

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号

特表2002-536440

(P2002-536440A)

(43) 公表日 平成14年10月29日 (2002. 10. 29)

(51) Int.Cl. <sup>7</sup>	識別記号	F I	テ-マ-ト* (参考)
C 0 7 D 281/02		C 0 7 D 281/02	4 C 0 3 6
A 6 1 K 31/554		A 6 1 K 31/554	4 C 0 6 3
A 6 1 P 3/06		A 6 1 P 3/06	4 C 0 8 6
9/10	1 0 1	9/10	1 0 1
C 0 7 D 417/12		C 0 7 D 417/12	
審査請求 未請求 予備審査請求 有 (全 426 頁)			

(21) 出願番号 特願2000-598488(P2000-598488)  
 (86) (22) 出願日 平成12年2月10日 (2000. 2. 10)  
 (85) 翻訳文提出日 平成13年8月13日 (2001. 8. 13)  
 (86) 国際出願番号 P C T / U S 0 0 / 0 2 5 0 3  
 (87) 国際公開番号 W O 0 0 / 4 7 5 6 8  
 (87) 国際公開日 平成12年8月17日 (2000. 8. 17)  
 (31) 優先権主張番号 6 0 / 1 1 9 , 9 3 3  
 (32) 優先日 平成11年2月12日 (1999. 2. 12)  
 (33) 優先権主張国 米国 (U S)

(71) 出願人 ジー. ディー. サール エルエルシー  
 アメリカ合衆国 イリノイ州 スコーキー  
 オールド オーチャード ロード 5200  
 コーポレート パテント デパートメン  
 ト  
 (72) 発明者 トレフソン マイケル ビー.  
 アメリカ合衆国 イリノイ州 ヘインズビ  
 ル ビッグ ホーン ドライブ 357  
 (72) 発明者 コロズィエフ スティーブ エイ.  
 アメリカ合衆国 ミズーリ州 ボールウィ  
 ン クラージョン ロード 2448  
 (74) 代理人 弁理士 清水 初志 (外1名)

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 回腸胆汁酸輸送およびタウロコール酸塩取り込みの阻害剤としての活性を有する新規 1, 2-ベンゾチアゼピン

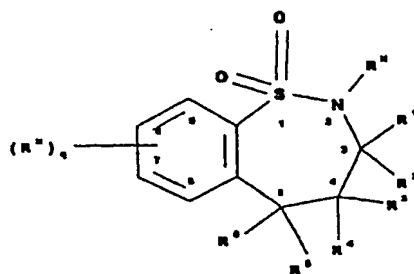
(57) 【要約】

新規1, 2-ベンゾチアゼピン、誘導体およびその類似体、それらを含む薬学的組成物、およびその医学での用途、特にアテローム性動脈硬化症および/または高コレステロール血症に関連した疾患のような、高脂血症疾患、病態および/または障害の予防および/または治療における用途。

## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 式(1)の化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ：

## 【化1】



式中：

$q$ は1～4の整数である；

$R^1$  および  $R^2$  は、水素およびヒドロカルビルからなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく、そして上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

$R^3$  および  $R^4$  は、水素；ヒドロカルビル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される；または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$ ； $=NOR^9$ ； $=S$ ； $=NNR^9R^{10}$ ； $=NR^9$ ；または $=CR^{11}R^{12}$ を形成する；

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、水素；ヒドロカルビル；アミノ；およびヒドロカルビルアミノからなる群より独立して選択され；上記ヒドロカルビル部分は選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく；そして上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素；-CN；ハロゲン；オキソ；ヒドロカルビル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> からなる群より独立して選択される；上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく；そして上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

<sup>1)</sup> $R^5$  および  $R^6$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルは、選択的にハロゲン；-NO<sub>2</sub>；-CN；オキソ；ヒドロカルビル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup> からなる群より独立して選択され；式中、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく；そして上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素およびヒドロカルビルからなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく、および上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；または

式中、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、 $A^-$ は、薬学的に許容される陰イオンであり、 $M$ は薬学的に許容される陽イオンである；および

式中 $R^9$ は先に定義したとおりである；または

$R^4$ および $R^6$ は共に結合を表す；ならびに

$R^N$ は、水素およびヒドロカルビルからなる群より選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく、そして上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

一つもしくはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、選択的に水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；ヒドロカルビル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは、選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく、そして上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $n$ は0、1または2である；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $A^-$ および $M$ は上記の通りである；



但し、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、および $R^6$ の少なくとも一つは、水素またはアルキル以外のラジカルである；ならびに

但し、 $R^5$ もしくは $R^6$ がアリールである場合、 $R^5$ および $R^6$ のもう一方の基はヘテロシクロアルキル以外のラジカルである。

【請求項2】 以下である、請求項1記載の化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ：

$q$ は1～4の整数である；

$R^1$ および $R^2$ は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$ および $R^2$ は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキルまたは $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルケニルを形成する；

式中、 $R^1$ および $R^2$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^w$ ； $A^-$ ； $-SR^9$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；および

式中、 $R^1$ および $R^2$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル

ル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9$ ； $-P(O)R^9$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^w$ は、独立して水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アルキルアンモニウムアルキル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；カルボキシアリール；カルボキシヘテロシクリル；アミノ；アルキルアミノ；カルボキシアルキルアミノ；アルコキシアルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $A^-$ は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$R^3$  および  $R^4$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される；または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$ ； $=NOR^9$ ； $=S$ ； $=NNR^9R^{10}$ ； $=NR^9$ ；または $=CR^{11}R^{12}$ を形成する；

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素； $-CN$ ；ハロゲン；オキソ；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；シクロアルキル；シクロアルケニル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シアノアルキル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、上記の通りである；ならびに

$R^5$  および  $R^6$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；

アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^5$  および  $R^6$  の、アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン； $-NO_2$ ； $-CN$ ；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-NR^{13}C(O)R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)NR^{14}R^{15}$ ； $-NR^{13}CO_2R^{14}$ ； $-OC(O)R^{13}$ ； $-OC(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}SOR^{14}$ ； $-NR^{13}SO_2R^{14}$ ； $-NR^{13}SONR^{14}R^{15}$ ； $-NR^{13}SO_2NR^{14}R^{15}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ；および $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカル of アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^7$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および $-P(O)(OR^7)OR^8$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；および

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカル of アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-N^+R^7R^8A--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A--$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A--$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $M$ は薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^*$ 、および $A^-$ は上記の通りである；ならびに

$R^*$ は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アラルキル；およびヘテロシクリルアルキルからなる群より選択される；および

一つもしくはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}R^{18}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^x$ のアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^*A^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S$

(O)R<sup>9</sup> ; -SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup> ; -SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup> ; -CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup> ; -CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> ; -SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> ; -PO(OR<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup> ; -P<sup>9</sup>R<sup>10</sup> ; -P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>11</sup>R<sup>12</sup>A<sup>-</sup> ; -S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup> ; および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい ; ならびに

式中、R<sup>x</sup> の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン ; -CN ; -NO<sub>2</sub> ; オキソ ; アルキル ; シクロアルキル ; ポリアルキル ; ハロアルキル ; ヒドロキシアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; ポリエーテル ; -OR<sup>13</sup> ; -NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -SR<sup>13</sup> ; -S(O)R<sup>13</sup> ; -SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup> ; -SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup> ; -NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup> ; -NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup> ; -CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup> ; -OM ; -SO<sub>2</sub>OM ; -SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -C(O)OM ; -COR<sup>13</sup> ; -P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -P<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup> ; -P(OR)<sup>13</sup>OR<sup>14</sup> ; -S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup> ; -N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup> ; および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい ; ならびに

式中、炭素を含むR<sup>x</sup> ラジカルは、選択的に、-O- ; NR<sup>13</sup> ; -N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup> ; -S- ; -SO- ; -SO<sub>2</sub>- ; -S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>A<sup>-</sup> ; -PR<sup>13</sup>- ; -P(O)R<sup>13</sup> ; -PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> ; -P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup> ; フェニレン ; アミノ酸残基 ; ペプチド残基 ; ポリペプチド残基 ; 炭化水素残基 ; ポリエーテル ; またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく、上記フェニレン ; アミノ酸残基 ; ペプチド残基 ; ポリペプチド残基 ; 炭化水素残基 ; およびポリアルキルは、選択的に、-O- ; -NR<sup>9</sup>- ; -N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup> ; -S- ; -SO- ; -SO<sub>2</sub>- ; -S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup> ; -PR<sup>9</sup>- ; -P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup> ; または -P(O)R<sup>9</sup>- によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい ; および

式中、R<sup>18</sup> は、アルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; 四級ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; アシル ; アルコキシカルボニル ; アリールアルコキシカルボニル ; およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される ; ならびに

式中、R<sup>18</sup> のアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; 四級ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; アシル ; アルコキシカルボニル ; アリールアルコキシカルボニル ; およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン ; -CN ; -NO<sub>2</sub> ; オキソ ; -OR<sup>9</sup> ; -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> ; -N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>11</sup>R<sup>12</sup>A<sup>-</sup> ; -SR<sup>9</sup> ; -S(O)R<sup>9</sup> ; -SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup> ; -SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> ; -CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup> ; -CON

$R^9 R^{10}$  ;  $-SO_2 OM$  ;  $-SO_2 NR^9 R^{10}$  ;  $-PR^9 R^{10}$  ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$  ;  $-PO(OR^{16})OR^{17}$  ; および  $-C(O)OM$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい ; ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および  $M$  は上記の通りである。

【請求項3】 以下である、請求項1記載の化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ :

$q$  は 1 ~ 4 の整数である ;

$R^1$  および  $R^2$  は、水素 ; アルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリールアルキル ; アルコキシアルキル ; アルコキシアルケニル ; アルコキシアルキニル ; アルキルアリール ; および (ポリアルキル) アリールからなる群より独立して選択される ; または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルもしくは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する ;

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリールアルキル ; アルコキシアルキル ; アルコキシアルケニル ; アルコキシアルキニル ; アルキルアリール ; および (ポリアルキル) アリールラジカルは、選択的に、 $-CN$  ; ハロゲン ; オキソ ;  $-OR^9$  ;  $-NR^9 R^{10}$  ;  $-N^+ R^9 R^{10} R^w A^-$  ;  $-SR^9$  ;  $-S^+ R^9 R^{10} A^-$  ;  $-PR^9 R^{10}$  ;  $-P^+ R^9 R^{10} R^w A^-$  ;  $-S(O)R^9$  ;  $-SO_2 R^9$  ;  $-SO_3 R^9$  ;  $-CO_2 R^9$  ; および  $-CONR^9 R^{10}$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい ; ならびに

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリールアルキル ; アルコキシアルキル ; アルコキシアルケニル ; アルコキシアルキニル ; アルキルアリール ; および (ポリアルキル) アリールラジカルは、選択的に、 $-O-$  ;  $-NR^9-$  ;  $-N^+ R^9 R^{10} A^-$  ;  $-S-$  ;  $-SO-$  ;  $-SO_2-$  ;  $-S^+ R^9 A^-$  ;  $-PR^9-$  ;  $-P(O)R^9-$  ;  $-P^+ R^9 R^{10} A^-$  ; またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい ; および

$R^9$ 、 $R^{10}$ 、および  $R^w$  は、独立して水素 ; アルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; アルキルアンモニウムアルキル ;

アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシアルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される、または

式中A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである；および

R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>は共に、=O；=NOR<sup>9</sup>；=S；=NNR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；=NR<sup>9</sup>；または=CR<sup>11</sup>R<sup>12</sup>を形成する；

式中、R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、水素；-CN；ハロゲン；オキソ；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；カルボキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；シクロアルキル；シアノアルキル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、上記の通りである；ならびに

R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>からなる群より独立して選択される；

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>



$R^1 R^3 R^4 R^5 A^-$  ;  $-P(OR^1 R^3)OR^1 R^4$  ;  $-S^+ R^1 R^3 R^4 A^-$  ; および  $-N^+ R^1 R^3 R^4 R^5 A^-$  からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい ; および

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$  ; ハロゲン ; ヒドロキシ ; オキソ ; アルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; 四級ヘテロシクリル ;  $-OR^7$  ;  $-NR^7 R^8$  ;  $-SR^7$  ;  $-S(O)R^7$  ;  $-SO_2 R^7$  ;  $-SO_3 R^7$  ;  $-CO_2 R^7$  ;  $-CONR^7 R^8$  ;  $-N^+ R^7 R^8 R^9 A^-$  ;  $-P(O)R^7 R^8$  ;  $-PR^7 R^8$  ;  $-P^+ R^7 R^8 R^9 A^-$  ; および  $-P(O)(OR^7)OR^8$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい ; ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$  ;  $-NR^7-$  ;  $-N^+ R^7 R^8 A^-$  ;  $-S-$  ;  $-SO-$  ;  $-SO_2-$  ;  $-S^+ R^7 A^-$  ;  $-PR^7-$  ;  $-P(O)R^7-$  ;  $-P^+ R^7 R^8 A^-$  ; またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい ; ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素およびアルキルからなる群より独立して選択される ; ならびに

式中、 $R^1 R^3$ 、 $R^1 R^4$ 、および  $R^1 R^5$  は、水素 ; アルキル ; ハロアルキル ; シクロアルキル ; ポリアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; 四級ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; 四級ヘテロシクリルアルキル ; アルキルアリールアルキル ; アルキルヘテロシクリルアルキル ; アルキルアンモニウムアルキル ; カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル ; およびポリエーテルからなる群より独立して選択される ; または

式中、 $R^1 R^3$  および  $R^1 R^4$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する ; ま

たは

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；および

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；スルホアルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアリル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9 R^{10}$ ； $-N^+ R^9 R^{10}$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2 R^9$ ； $-SO_3 R^{16}$ ； $-CO_2 R^{16}$ ； $-CONR^9 R^{10}$ ； $-SO_2 NR^9 R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9 R^{10}$ ； $-P^+ R^9 R^{10} R^{11} A^-$ ； $-S^+ R^9 R^{10} A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；および

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+ R^9 R^{10} A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+ R^9 A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+ R^9 R^{10} A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$  および  $R^{17}$  は、 $R^9$  および  $M$  からなる群より独立して選択される；ならびに

$M$  は薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^0$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は上記の通りである；ならびに

$R^N$ は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；およびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ポリエーテル；アシルオキシ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}R^{18}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^x$ のアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；およびアシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン： $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^x$ の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；および

式中、炭素を含む $R^x$ ラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^-$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ；フェニレン；アミノ酸；ペプチド；ポリペプチド；炭化水素；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく、上記のフェニレン；アミノ酸；ペプチド；ポリペプチド；炭化水素；およびポリアルキルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $P^+R^9R^{10}A^-$ または $-P(O)R^9-$ によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{18}$ は、アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールオキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される；ならびに

式中、 $R^{18}$ のアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールオキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ；および $-C(O)OM$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および $M$ は上記の通りである。

【請求項4】 以下である、請求項1記載の化合物；またはその薬学的に許容される塩、溶媒化合物、もしくはプロドラッグ：

$q$ は1～4の整数である；

$R^1$ および $R^2$ は、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_3-C_{10})$ シクロアルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルコキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルコキシ $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_1-C_{10})$ アルコキシ $(C_2-C_{10})$ アルキニル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアリー

ル；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、それらが結合する炭素と共に、(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキルを形成する；ならびに

式中、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> の (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、-CN；ハロゲン；オキソ；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>；-PR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> の (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、-O-；-NR<sup>9</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>9</sup>-；-P(O)R<sup>9</sup>-；P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、および R<sup>w</sup> は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、A<sup>-</sup> は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>

) アルキニル; アリール; ヘテロシクリル;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ; および  $-SO_3R^9$  からなる群より独立して選択される; または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$ ;  $=NOR^9$ ;  $=S$ ;  $=NNR^9R^{10}$ ;  $=NR^9$ ; または  $=CR^{11}R^{12}$  を形成する;

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素;  $-CN$ ; ハロゲン; オキソ;  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_2-C_{10})$  アルケニル;  $(C_2-C_{10})$  アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル; カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル; カルボ  $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル; シアノ  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ;  $-SO_3R^9$ ;  $-CO_2R^9$ ; および  $-CONR^9R^{10}$  からなる群より独立して選択される; または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する; ならびに

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は上記の通りである; および

$R^5$  および  $R^6$  は、水素;  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル;  $(C_2-C_{10})$  アルケニル;  $(C_2-C_{10})$  アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル;  $-OR^9$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ; および  $-SO_3R^9$  からなる群より独立して選択される;

式中、 $R^5$  および  $R^6$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル;  $(C_2-C_{10})$  アルケニル;  $(C_2-C_{10})$  アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリルラジカルは、選択的に、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ; オキソ;  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ポリアルキル; ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル;  $(C_2-C_{10})$  アルケニル;  $(C_2-C_{10})$  アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ポリエーテル;  $-OR^{13}$ ;  $-NR^{13}R^{14}$ ;  $-SR^{13}$ ;  $-S(O)R^{13}$ ;  $-SO_2R^{13}$ ;  $-SO_3R^{13}$ ;  $-NR^{13}OR^{14}$ ;  $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ;  $-CO_2R^{13}$ ;  $-OM$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)OM$ ;  $-COR^{13}$ ;  $-NR^{13}C(O)R^{14}$ ;  $-NR^{13}C(O)NR^{14}R^{15}$ ;  $-NR^{13}CO_2R^{14}$ ;  $-OC(O)R^{13}$ ;  $-OC(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-NR^{13}SOR^{14}$ ;  $-NR^{13}SO_2R^{14}$ ;  $-NR^{13}SONR^{14}R^{15}$ ;  $-NR^{13}SO_2NR^{14}R^{15}$ ;  $-P(O)R^{13}R^{14}$ ;  $-PR^{13}R^{14}$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$ ;  $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ; および  $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$  からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以

上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルは、 $(C_1-C_{10})$  アルキル、ポリアルキル、ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル、ヒドロキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル、 $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル、 $(C_2-C_{10})$  アルケニル、 $(C_2-C_{10})$  アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル、ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ； $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7$   $R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^7$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および  $-P(O)(OR^7)OR^8$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルは、 $(C_1-C_{10})$  アルキル、ポリアルキル、ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル、ヒドロキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル、 $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル、 $(C_2-C_{10})$  アルケニル、 $(C_2-C_{10})$  アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル、ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-N^+R^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素および  $(C_1-C_{10})$  アルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；

または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；

または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；アミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ； $(C_1-C_{10})$  アルキル；スルホ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム



(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；アミノカルボニル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、-O-；-NR<sup>9</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>9</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-P(O)R<sup>9</sup>-；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>16</sup>およびR<sup>17</sup>は、R<sup>9</sup>およびMからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、Mは薬学的に許容される陽イオンである；および

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>n</sup>、およびA<sup>-</sup>は上記の通りである；および

R<sup>n</sup>は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；およびアリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より選択される；ならびに一つもしくはそれ以上のR<sup>x</sup>ラジカルは、水素；ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキル；ポリアルキル；ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；-(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ポリエーテル；アシルオキシ；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-S(O)<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>14</sup>C(O)R<sup>13</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；COR<sup>13</sup>；-OR<sup>18</sup>；-S(O)<sub>n</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>18</sup>；-NR<sup>18</sup>OR<sup>14</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

式中、R<sup>x</sup>の (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>) シクロアルキル；ポリアルキル；ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヒドロキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ポリエーテル；およびアシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；オキソ；-OR<sup>16</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>11</sup>R<sup>12</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>16</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-

$PO(OR^{16})OR^{17}$ ;  $-PR^9R^{10}$ ;  $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ; または  $-S^+R^9R^{10}A^-$  によってさらに置換してもよい; ならびに

式中、 $R^x$  の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ; オキソ;  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル; ポリアルキル; ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ヒドロキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル;  $(C_2-C_{10})$  アルケニル;  $(C_2-C_{10})$  アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ポリエーテル;  $-OR^{13}$ ;  $-NR^{13}R^{14}$ ;  $-SR^{13}$ ;  $-S(O)R^{13}$ ;  $-SO_2R^{13}$ ;  $-SO_3R^{13}$ ;  $-NR^{13}OR^{14}$ ;  $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ;  $-CO_2R^{13}$ ;  $-OM$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)OM$ ;  $-COR^{13}$ ;  $-P(O)R^{13}R^{14}$ ;  $-PR^{13}R^{14}$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$ ;  $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ; および  $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、炭素を含む  $R^x$  ラジカルは、選択的に、 $-O-$ ;  $-NR^{13}-$ ;  $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^{13}A^-$ ;  $-PR^{13}-$ ;  $-P(O)R^{13}-$ ;  $-PR^{13}-$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ; フェニレン; アミノ酸残基; ペプチド残基; ポリペプチド残基; 炭化水素残基; ポリエーテル; またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素有してもよく、上記フェニレン; アミノ酸残基; ペプチド残基; ポリペプチド残基; 炭化水素残基; およびポリアルキルは、選択的に、 $-O-$ ;  $-NR^9-$ ;  $-N^+R^9R^{10}A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^9A^-$ ;  $-PR^9-$ ;  $PR^9R^{10}A^-$  または  $-P(O)R^9-$  によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素有してもよい; および

式中、 $R^{18}$  は、 $(C_1-C_{10})$  アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル; アシル; およびアリール  $(C_1-C_{10})$  アルコキシカルボニルからなる群より選択される; および

式中、 $R^{18}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル; アシル; およびアリール  $(C_1-C_{10})$  アルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン;  $-CN$ ; オキソ;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ;  $-SO_3R^9$ ;  $-CO_2R^9$ ;  $-CONR^9R^{10}$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^9R^{10}$ ;  $-PR^9R^{10}$ ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$ ;  $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ; および  $-C(O)OM$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; および

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および $M$ は上記の通りである；

但し、アリールは、選択的に置換されたフェニル、ビフェニル、およびナフチルからなる群より選択される；および

但し、ヘテロシクリルは、5～10員環を含み、そして酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より選択されるヘテロ原子である一つもしくはそれ以上の環原子を含む、選択的に置換されたヘテロシクリルからなる群より選択される。

【請求項5】 以下である、請求項1記載の化合物；またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む。

$q$ は1～4までの整数である；

$R^1$ および $R^2$ は、水素、メチル、エチル、 $n$ -プロピル、イソプロピル、 $n$ -ブチル、イソブチル、 $sec$ -ブチル、 $tert$ -ブチル、ペンチル、ヘキシル、フェノキシメチレン、フェノキシエチレン、フェノキシプロピレン、ピリジニルオキシメチレン、ピリジニルオキシエチレン、メチルピリジニルオキシメチレン、メチルピリジニルオキシエチレン、ピリミジニルオキシメチレン、およびピリミジニルオキシエチレンからなる群より独立して選択される；または

$R^1$ および $R^2$ は、それらが結合する炭素と共に、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、またはシクロヘキシルを形成する；ならびに

$R^3$ および $R^4$ は、水素、ヒドロキシ、メチル、エチル、フェニル、ピリジニル、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、およびジエチルアミノからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^5$ および $R^6$ は、水素、フェニル、クロロフェニル、フルオロフェニル、ブロモフェニル、ヨードフェニル、ヒドロキシフェニル、メトキシフェニル、エトキシフェニル、メトキシ(クロロフェニル)、メトキシ(フルオロフェニル)、メトキシ(ブロモフェニル)、メトキシ(ヨードフェニル)、エトキシ(クロロフェニル)、エトキシ(フルオロフェニル)、エトキシ(ブロモフェニル)、エトキシ(ヨードフェニル)、ニトロフェニル、アミノフェニル、メチルアミノフェニル、ジメチルアミノフェニル、エチルアミノフェニル、ジエチルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムフェニル、トリエチルアンモニウムフェニル、トリメ

チルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムメ  
 チルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミ  
 ノフェニル、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリメ  
 チルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウム  
 プロピルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムブチルカルボニル  
 アミノフェニル、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、メ  
 チルカルボニルアミノフェニル、クロロメチルカルボニルアミノフェニル、フル  
 オロメチルカルボニルアミノフェニル、ブロモメチルカルボニルアミノフェニル  
 、ヨードメチルカルボニルアミノフェニル、エチルカルボニルアミノフェニル、  
 クロロエチルカルボニルアミノフェニル、フルオロエチルカルボニルアミノフェ  
 ニル、ブロモエチルカルボニルアミノフェニル、ヨードエチルカルボニルアミノ  
 フェニル、プロピルカルボニルアミノフェニル、クロロプロピルカルボニルアミ  
 ノフェニル、フルオロプロピルカルボニルアミノフェニル、ブロモプロピルカル  
 ボニルアミノフェニル、ヨードプロピルカルボニルアミノフェニル、ブチルカル  
 ボニルアミノフェニル、クロロブチルカルボニルアミノフェニル、フルオロブチ  
 ルカルボニルアミノフェニル、ブロモブチルカルボニルアミノフェニル、ヨード  
 ブチルカルボニルアミノフェニル、3,4-ジオキシメチレンフェニル、ピリジニル  
 、メチルピリジニル、ピリジニウム、メチルピリジニウム、チエニル、クロロチ  
 エニル、フルオロチエニル、ブロモチエニル、ヨードチエニル、メトキシカルボ  
 ニルフェニル、エトキシカルボニルフェニル、トリメチルアンモニウムエトキシ  
 エトキシエトキシフェニル、トリエチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ  
 フェニル、クロロエトキシエトキシエトキシフェニル、フルオロエトキシエトキ  
 シエトキシフェニル、ブロモエトキシエトキシエトキシフェニル、ヨードエトキ  
 シエトキシエトキシフェニル、ピリジニウムエトキシエトキシエトキシフェニル  
 、ピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、メチルピペラジニル  
 オキシメトキシエトキシエトキシフェニル、ジメチルピペラジニルオキシメトキ  
 シエトキシエトキシフェニル、ピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフ  
 ェニル、メチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、および  
 ジメチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニルからなる群より

独立して選択される；ならびに

$R^N$  は、水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、*n*-ブチル、*n*-ペンチル、*n*-ヘキシル、およびベンジルからなる群より選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上の $R^x$  ラジカルは、ヒドロキシ、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、エチルチオ、エチルスルフィニル、エチルスルホニル、アミノ、ヒドロキシアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、*N*-メチル-*N*-カルボキシメチル-アミノ、*N,N*-ジメチル-*N*-カルボキシメチル-アンモニウム、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、*n*-プロピルカルボニルアミノ、*n*-ブチルカルボニルアミノ、*n*-ペンチルカルボニルアミノ、*n*-ヘキシルカルボニルアミノ、ベンジロキシカルボニルアミノ、アミノイミドカルボニルアミノ、モルホリニル、*N*-メチル-モルホリニウム、アゼチジニル、*N*-メチル-アゼチジニウム、ピロリジン、*N*-メチル-ピロリジニウム、ピペラジニル、*N*-メチルピペラジニル、*N,N'*-ジメチル-ピペラジニウム、ピペリジニル、メチルピペリジニル、*N*-メチル-ピペリジニウム、およびチエニルからなる群より独立して選択される。

【請求項6】 以下である、請求項1記載の化合物；またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ。

$q$ は1～4までの整数である；

$R^1$  および $R^2$  は、水素および( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、( $C_3-C_{10}$ ) アルキルを形成する；ならびに

$R^3$  および $R^4$  は、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^5$  はフェニルであり、上記フェニルは選択的に、ハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$

; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ポリエーテル; -OR<sup>13</sup>; -NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>; および -NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup> からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される; ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、およびR<sup>15</sup>は、水素; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; 四級ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; およびポリエーテルからなる群より独立して選択される; または

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、およびR<sup>15</sup>の(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; 四級ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; およびポリエーテルラジカルは、ハロゲン; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; -OR<sup>16</sup>; -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>; および -CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、R<sup>9</sup> およびR<sup>10</sup>は、水素; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; アンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシヘテロシクリル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノ; およびアシルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中、A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである; ならびに

式中、R<sup>11</sup> およびR<sup>12</sup>は、水素; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; およびカルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より独立して選択される; または

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、それらが結合する炭素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、R<sup>w</sup> および R<sup>6</sup> は、請求項2の定義通りである；ならびに

R<sup>6</sup> は、水素である；ならびに

R<sup>N</sup> は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；およびアリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上のR<sup>x</sup> ラジカルは、水素；-NO<sub>2</sub>；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> からなる群より独立して選択される；

式中、R<sup>13</sup> および R<sup>14</sup> は、上記の通りである；および

但し、アリールは、選択的に置換されたフェニル、ビフェニル、およびナフチルからなる群より選択される；および

但し、ヘテロシクリルは、5～10員環を含み、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より選択されるヘテロ原子である一つもしくはそれ以上の環原子を含む、選択的に置換されたヘテロシクリルからなる群より選択される。

【請求項7】 以下である、請求項1記載の化合物；またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物もしくはプロドラッグ。

qは1～4までの整数である；

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、エチルおよびn-ブチルからなる群より独立して選択される；または

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、それらが結合する炭素と共に、シクロペンチルを形成する；ならびに

R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> の一つは水素であり、R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> のもう一つはヒドロキシである；ならびに

R<sup>5</sup> は、フェニル、ヒドロキシフェニル、メトキシフェニル、エトキシフェニル、ニトロフェニル、アミノフェニル、メチルアミノフェニル、ジメチルアミノフェニル、エチルアミノフェニル、ジエチルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムフェニル、トリエチルアンモニウムフェニル、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリエチル

ルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、メチルカルボニルアミノフェニル、クロロメチルカルボニルアミノフェニル、フルオロメチルカルボニルアミノフェニル、ブロモメチルカルボニルアミノフェニル、ヨードメチルカルボニルアミノフェニル、エチルカルボニルアミノフェニル、クロロエチルカルボニルアミノフェニル、フルオロエチルカルボニルアミノフェニル、ブロモエチルカルボニルアミノフェニル、ヨードエチルカルボニルアミノフェニル、プロピルカルボニルアミノフェニル、クロロプロピルカルボニルアミノフェニル、フルオロプロピルカルボニルアミノフェニル、ブロモプロピルカルボニルアミノフェニル、ヨードプロピルカルボニルアミノフェニル、ブチルカルボニルアミノフェニル、クロロブチルカルボニルアミノフェニル、フルオロブチルカルボニルアミノフェニル、ブロモブチルカルボニルアミノフェニル、ヨードブチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシフェニル、トリエチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシフェニル、クロロエトキシエトキシエトキシフェニル、フルオロエトキシエトキシエトキシフェニル、ブロモエトキシエトキシエトキシフェニル、ヨードエトキシエトキシエトキシフェニル；およびピリジニウムエトキシエトキシエトキシフェニルからなる群より選択される；ならびに

$R^6$ は水素である；

$R^N$ は、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、ヒドロキシ、メチル、エチル、メトキシ、エトキシ、アミノ、ヒドロキシアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、 $N$ -メチル- $N$ -カルボキシメチル-アミノ、 $N,N$ -ジメチル- $N$ -カルボキシメチル-アンモニウム、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカ



ルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、ベンジルオキシカルボニルアミノ、およびアミノイミドカルボニルアミノからなる群より独立して選択される。

【請求項8】 以下からなる群より選択される化合物から選択される、請求項1記載の化合物、および薬学的に許容されるその塩：

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-メチル-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

5-クロロ-N-[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ペンタナミド；

5-[[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N, N-N-トリエチル-5-オキソ-ペンタナミニウムトリフルオロアセテート；

2-クロロ-N-[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アセトアミド；

2-[[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N, N-N-トリエチル-5-オキソエタナミニウムクロライド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-(((2-ヨードエトキシ)エトキシ)エトキシ)フェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

1-[2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラ

ヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]エチル]ピリジニウム;

2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N,N,N-トリエチルエタナミニウムイオダイド;

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-メトキシフェニル)-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド;

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシドおよび(4S, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド;

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド;

5-ブromo-N-[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]ペンタナミド];

5-[[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-5-オキソ-1-ペンタナミニウムトリフルオロアセテート;

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-フェニル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド;

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール1,1-ジオキシド

2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N,N,N-トリメチルエタナミニウムイオダイド;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-5-[3-(エチルアミノ)フェニル]-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド; および

(4R, 5R)-7-(ジメチルアミノ)-2-エチル-4, 5-ジヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-スピロ[1, 2-ベンゾチアゼピン-3(2H), 1'-シクロペンタン]-4-オール1, 1-ジオキシド。

【請求項9】  $R^5$  および  $R^6$  が、H; アリール; ヘテロシクリル; および四級ヘテロシクリルからなる群より独立して選択される、請求項2記載の化合物:

式中、 $R^5$  および  $R^6$  のアリール; ヘテロシクリル; および四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン; -CN; -NO<sub>2</sub>; オキシ; アルキル; ポリアルキル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; シクロアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; ポリエーテル; -OR<sup>1 3</sup>; -NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -SR<sup>1 3</sup>; -S(O)R<sup>1 3</sup>; -SO<sub>2</sub>R<sup>1 3</sup>; -SO<sub>3</sub>R<sup>1 3</sup>; -NR<sup>1 3</sup>OR<sup>1 4</sup>; -NR<sup>1 3</sup>NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>; -CO<sub>2</sub>R<sup>1 3</sup>; -OM; -SO<sub>2</sub>OM; -SO<sub>2</sub>NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -C(O)NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -C(O)OM; -COR<sup>1 3</sup>; -NR<sup>1 3</sup>C(O)R<sup>1 4</sup>; -NR<sup>1 3</sup>C(O)NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>; -NR<sup>1 3</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>1 4</sup>; -OC(O)R<sup>1 3</sup>; -OC(O)NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -NR<sup>1 3</sup>SOR<sup>1 4</sup>; -NR<sup>1 3</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>1 4</sup>; -NR<sup>1 3</sup>SONR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>; -NR<sup>1 3</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>; -PR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -P(O)R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -PR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>; -P<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>A<sup>-</sup>; -P(OR<sup>1 3</sup>)OR<sup>1 4</sup>; -S<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>A<sup>-</sup>; および -N<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>A<sup>-</sup> からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルはアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-CN; ハロゲン; ヒドロキシ; オキシ;

アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および $-P(O)(OR^7)OR^8$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；および

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキシ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルア

ルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル；-OR<sup>16</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>16</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-PO(O R<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>；-P<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>11</sup>A<sup>-</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

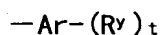
式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、およびR<sup>15</sup>の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、-O-；-NR<sup>9</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>9</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-P(O)R<sup>9</sup>-；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>16</sup>およびR<sup>17</sup>は、R<sup>9</sup>およびMからなる群より独立して選択される；ならびに

Mは薬学的に許容される陽イオンである；および

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>w</sup>、およびA<sup>-</sup>は請求項2に記載の通りである。

【請求項10】 R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>が以下の式を有する、請求項2記載の化合物：



式中、

tは0～5までの整数である；

Arは、フェニル；チオフェニル；ピリジル；ピペラジニル；ピペロニル；ピロリル；ナフチル；フラニル；アントラセニル；キノリニル；イソキノリニル；キノキサリニル；イミダゾリル；ピラゾリル；オキサゾリル；イソキサゾリル；ピリミジニル；チアゾリル；トリアゾリル；イソチアゾリル；インドリル；ベンゾイミダゾリル；ベンズオキサゾリル；ベンゾチアゾリル；およびベンゾイソチアゾリルからなる群より選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上のR<sup>y</sup>は、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>1 3</sup>；-NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-SR<sup>1 3</sup>；-S(O)R<sup>1 3</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>1 3</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>1 3</sup>；-NR<sup>1 3</sup>OR<sup>1 4</sup>；-NR<sup>1 3</sup>NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>1 3</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-C(O)NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>1 3</sup>；-NR<sup>1 3</sup>C(O)R<sup>1 4</sup>；-NR<sup>1 3</sup>C(O)NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>；-NR<sup>1 3</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>1 4</sup>；-OC(O)R<sup>1 3</sup>；-OC(O)NR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-NR<sup>1 3</sup>SOR<sup>1 4</sup>；-NR<sup>1 3</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>1 4</sup>；-NR<sup>1 3</sup>SONR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>；-NR<sup>1 3</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>；-PR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-P(O)R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-PR<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>1 3</sup>)OR<sup>1 4</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>1 3</sup>R<sup>1 4</sup>R<sup>1 5</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される；および

式中、R<sup>y</sup>ラジカル、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキルおよびポリエーテル置換体は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>y</sup>ラジカル、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S

+R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>; -PR<sup>7</sup>-; -P(O)R<sup>7</sup>-; -P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>; またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい; および

式中、R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> は、水素; アルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、および R<sup>15</sup> は、水素; アルキル; ハロアルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; 四級ヘテロシクリルアルキル; アルキルアリールアルキル; アルキルヘテロシクリルアルキル; アルキルアンモニウムアルキル; アミノカルボニルアルキル; アルキルアミノカルボニルアルキル; カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル; およびポリエーテルからなる群より独立して選択される; または

式中、R<sup>13</sup> および R<sup>14</sup> は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する; または

式中、R<sup>14</sup> および R<sup>15</sup> は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する; ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、および R<sup>15</sup> のアルキル; ハロアルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; 四級ヘテロシクリルアルキル; アルキルアリールアルキル; アルキルヘテロシクリルアルキル; アルキルアンモニウムアルキル; アミノカルボニルアルキル; アルキルアミノカルボニルアルキル; カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル; およびポリエーテルラジカルは、ハロゲン; -CN; スルホ; オキソ; アルキル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; スルホアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリルアルキル; カルボ霧; カルボキシアルキル; グアニジニル; -OR<sup>16</sup>; -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>11</sup>A<sup>-</sup>; -SR<sup>16</sup>; -S(O)R<sup>9</sup>; -SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>; -SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>; -CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>; -CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -PO(OR<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>; -PR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>11</sup>A<sup>-</sup>; -S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>; および炭化水素残基からなる群より選択さ

れる一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；および

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^{--}$ ； $-PR^9-$ ； $-PR^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

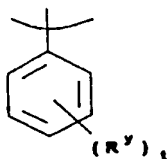
式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $M$ は、薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は、請求項2の定義の通りである。

【請求項11】  $R^5$ および $R^6$ の少なくとも一つが以下の式を有する、請求項2記載の化合物：

【化2】



(II)

式中、 $R^y$ および $t$ は請求項10に定義したとおりである。

【請求項12】  $R^N$ が水素、アルキル、およびアラルキルからなる群より選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項13】  $R^N$ が水素、 $(C_1-C_{10})$ アルキルおよびアリール $(C_1-C_{10})$ アルキルからなる群より選択される、請求項11記載の化合物。



【請求項14】  $R^N$  が水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項15】  $R^1$  および  $R^2$  が、水素、アルキル、および  $(C_3-C_{10})$  シクロアルキルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項16】  $R^1$  および  $R^2$  が、水素および  $(C_1-C_{10})$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項17】  $R^1$  および  $R^2$  が、 $(C_1-C_{10})$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項18】  $R^1$  および  $R^2$  が、 $(C_1-C_7)$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項19】  $R^1$  および  $R^2$  が、 $(C_2-C_4)$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項20】  $R^1$  および  $R^2$  が、同じ  $(C_1-C_{10})$  アルキルである、請求項11記載の化合物。

【請求項21】  $R^1$  および  $R^2$  が、エチル； $n$ -プロピル； $n$ -ブチル；およびイソブチルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項22】  $R^1$  および  $R^2$  がそれぞれ、 $n$ -ブチルである、請求項11記載の化合物。

【請求項23】  $R^1$  および  $R^2$  の一方がエチルであって、 $R^1$  および  $R^2$  のもう一方が  $n$ -ブチルである、請求項11記載の化合物。

【請求項24】  $q$  が1、2、または3である、請求項11記載の化合物。

【請求項25】  $q$  が1、または2である、請求項11記載の化合物。

【請求項26】  $q$  が1である、請求項11記載の化合物。

【請求項27】  $R^3$  および  $R^4$  が、水素および  $-OR^9$  からなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項28】  $R^9$  が水素である、請求項27記載の化合物。

【請求項29】 上記ヒドロキシ基が式(II)の上記構造とsyn関係にある、請求項28記載の化合物。

【請求項30】  $R^*$  ラジカルが、式(I)の構造のベンゾ環の7-、8-、およ

び9-位に存在する、請求項11記載の化合物。

【請求項31】  $R^x$  ラジカルが、式 (I) の構造のベンゾ環の7-、8-、または9-位の一つもしくはそれ以上に存在する、請求項11記載の化合物。

【請求項32】  $R^x$  ラジカルが、式 (I) の構造のベンゾ環の7-および9-位に存在する、請求項11記載の化合物。

【請求項33】  $R^x$  ラジカルが、式 (I) の構造のベンゾ環の7-位に存在する、請求項11記載の化合物。

【請求項34】 上記の一つもしくはそれ以上の $R^x$  は、アルキル；アリール；シクロアルキル；ヘテロシクリル；ポリアルキル；アシルオキシ；ポリエーテル；ハロゲン； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$  からなる群より独立して選択される、請求項32記載の化合物；

式中、アルキル；アリール；シクロアルキル；ヘテロシクリル；ポリアルキル；アシルオキシ；およびポリエーテルは、 $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ；オキシ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CN$ ；ハロゲン； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ；または $-S^+R^9R^{10}A^-$ によってさらに置換することができる；および

式中、 $R^x$  において、一つもしくはそれ以上の炭素は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^-$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換される；ならびに

式中、上記のポリアルキル；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基において、一つもしくはそれ以上の炭素は選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ；または $-P(O)R^9-$ によって置換される。

【請求項35】 上記の一つもしくはそれ以上の $R^x$  は、アルキル；アリール；シクロアルキル；ヘテロシクリル；ポリアルキル；アシルオキシ；ポリエーテル；ハロゲン； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$  からなる群より独立して選択される、請求項33

記載の化合物；

式中、アルキル；アリール；シクロアルキル；ヘテロシクリル；ポリアルキル；アシルオキシ；およびポリエーテルは、 $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ；オキソ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CN$ ；ハロゲン； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ；または $-S^+R^9R^{10}A^-$ によってさらに置換されうる；および

式中、 $R^x$ において、一つもしくはそれ以上の炭素は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^-$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換される；ならびに

式中、上記のポリアルキル；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基において、一つもしくはそれ以上の炭素は選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ；または $-P(O)R^9-$ によって置換される。

【請求項36】 上記の一つもしくはそれ以上の $R^x$ が、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択される、請求項34記載の化合物。

【請求項37】 上記の $R^x$ が、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択される、請求項35記載の化合物。

【請求項38】 上記の一つもしくはそれ以上の $R^x$ が、 $-OR^{13}$ および $-NR^{13}R^{14}$ からなる群より独立して選択される、請求項36記載の化合物。

【請求項39】 上記の $R^x$ が、 $-OR^{13}$ および $-NR^{13}R^{14}$ からなる群より独立して選択される、請求項37記載の化合物。

【請求項40】  $R^{13}$ および $R^{14}$ がそれぞれメチルである、請求項38記載の化合物。

【請求項41】  $R^{13}$ および $R^{14}$ がそれぞれメチルである、請求項39記載の化合物。

【請求項42】  $R^x$ 置換基が、式(II)の構造のフェニル環の3-位、または4-位に結合している、請求項11記載の化合物。

【請求項43】  $t$ が1または2である、請求項11記載の化合物。

【請求項44】  $t$ が1または2である、請求項42記載の化合物。

【請求項45】 一つもしくはそれ以上の $R^v$ が、水素；ハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-NR^{13}C(O)R^{14}$ からなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^w$ は、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；アンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボ $(C_1-C_{10})$ アルコキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $A^-$ は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

式中、 $R^{11}$ および $R^{12}$ は、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；アリー  
ル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびカルボ $(C_1-C_{10})$   
アルコキシ $(C_1-C_{10})$ アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$ および $R^{12}$ は、それらが結合する炭素原子と共に、環状環を形成する；なら  
びに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ およびMからなる群より独立して選択される；なら  
びに；

式中、Mは薬学的に許容される陽イオンである。

【請求項46】 上記のR<sup>9</sup>が、水素、クロロ、フルオロ、プロモ、ヨード、  
ヒドロキシ、メトキシ、エトキシ、ニトロ、アミノ、メチルアミノ、ジメチルア  
ミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルア  
ンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアン  
モニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルア  
ミノ、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウ  
ムプロピルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミ  
ノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウム  
ブチルカルボニルアミノ、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルア  
ミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、プロモメチルカルボニルアミノ、ヨー  
ドメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、クロロエチルカルボニル  
アミノ、フルオロエチルカルボニルアミノ、プロモエチルカルボニルアミノ、ヨー  
ドエチルカルボニルアミノ、プロピルカルボニルアミノ、クロロプロピルカル  
ボニルアミノ、フルオロプロピルカルボニルアミノ、プロモプロピルカルボニル  
アミノ、ヨードプロピルカルボニルアミノ、ブチルカルボニルアミノ、クロロブ  
チルカルボニルアミノ、フルオロブチルカルボニルアミノ、プロモブチルカルボ  
ニルアミノ、ヨードブチルカルボニルアミノ、メトキシカルボニル、エトキシカ  
ルボニル、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、トリエチルアン  
モニウムエトキシエトキシエトキシ、クロロエトキシエトキシエトキシ、フルオ  
ロエトキシエトキシエトキシ、プロモエトキシエトキシエトキシ、ヨードエトキ  
シエトキシエトキシ、ピリジニウムエトキシエトキシエトキシ、ピペラジニルオ

キシメトキシエトキシエトキシ、メチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、ジメチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、ピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、メチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、およびジメチルピペリジニルオキシエトキシエトキシフェニルからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項47】 上記の一つもしくはそれ以上のR<sup>9</sup>が、ヒドロキシ、メトキシ、エトキシ、ニトロ、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、クロロエチルカルボニルアミノ、フルオロエチルカルボニルアミノ、ブロモエチルカルボニルアミノ、ヨードエチルカルボニルアミノ、プロピルカルボニルアミノ、クロロプロピルカルボニルアミノ、フルオロプロピルカルボニルアミノ、ブロモプロピルカルボニルアミノ、ヨードプロピルカルボニルアミノ、ブチルカルボニルアミノ、クロロブチルカルボニルアミノ、フルオロブチルカルボニルアミノ、ブロモブチルカルボニルアミノ、ヨードブチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、トリエチルアンモニウムメトキシエトキシエトキシ、クロロエトキシエトキシエトキシ、フルオロエトキシエトキシエトキシ、ブロモエトキシエトキシエトキシ、ヨードエトキシエトキシエトキシ、ピリジニウムエトキシエトキシエトキシからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項48】 上記の一つもしくはそれ以上のR<sup>9</sup>が、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウム

エチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、トリエチルアンモニウムメトキシエトキシエトキシからなる群より独立して選択される、請求項11記載の化合物。

【請求項49】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$  が水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに  $R^1$  および  $R^2$  が水素、アルキル、および ( $C_1-C_{10}$ ) シクロアルキルからなる群より独立して選択される。

【請求項50】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$  が水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに  $R^3$  および  $R^4$  が、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される。

【請求項51】 上記のヒドロキシ基が式 (II) の上記構造と syn 関係にある、請求項50記載の化合物。

【請求項52】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$  が水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに  $R^x$  が、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および  $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$  からなる群より選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は請求項2の定義と同じである。

【請求項53】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^1$  および  $R^2$  は、水素、アルキル、および ( $C_3-C_{10}$ ) シクロアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^3$  および  $R^4$  は、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される。

【請求項54】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^1$  および  $R^2$  は、水素、アルキル、および ( $C_3-C_{10}$ ) シクロアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^x$  は、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および  $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$  からなる群より選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は請求項2の定義と同じである。

【請求項55】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^3$ および $R^4$ は、水素、およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；  
ならびに

$R^x$ は、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は請求項2の定義と同じである。

【請求項56】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$ が水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

$R^1$ および $R^2$ は、水素、アルキル、および( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに $R^3$ および $R^4$ が、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される。

【請求項57】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$ は、水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

$R^1$ および $R^2$ は、水素、アルキル、および( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに $R^x$ は、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は請求項2の定義と同じである。

【請求項58】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$ は、水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

$R^3$ および $R^4$ は、水素、およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；  
ならびに

$R^x$ は、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は請求項2の定義と同じである。

【請求項59】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^1$ および $R^2$ は、水素、アルキルおよび( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキルからなる群より独立して選択される；

$R^3$ および $R^4$ は、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；な



らびに

$R^x$  は、ポリエーテル： $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$  からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は請求項2の定義と同じである。

【請求項60】 以下である、請求項11記載の化合物：

$R^N$  は、水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される；ならびに  
 $R^1$  および  $R^2$  は、水素、アルキル、および ( $C_3-C_{10}$ ) シクロアルキルからなる群より独立して選択される； $R^3$  および  $R^4$  は、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^x$  は、ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$  からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は請求項2の定義と同じである。

【請求項61】  $R^N$  が、水素、( $C_1-C_{10}$ ) アルキル、およびアリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項62】  $R^N$  が水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項63】  $R^1$  および  $R^2$  が、水素および ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項64】  $R^1$  および  $R^2$  が、( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項65】  $R^1$  および  $R^2$  が、( $C_2-C_4$ ) アルキルからなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項66】  $R^1$  および  $R^2$  が、エチル； $n$ -プロピル； $n$ -ブチル；およびイソブチルからなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項67】  $R^1$  および  $R^2$  が、それぞれ  $n$ -ブチルである、請求項60記載の化合物。

【請求項68】  $R^1$  および  $R^2$  の一つがエチルであって、 $R^1$  および  $R^2$  のもう一つが  $n$ -ブチルである、請求項60記載の化合物。

【請求項69】  $q$  が 1、2 または 3 である、請求項60記載の化合物。

【請求項70】  $q$ が1または2である、請求項60記載の化合物。

【請求項71】  $q$ が1である、請求項60記載の化合物。

【請求項72】  $R^x$ ラジカルが、式(I)の構造のベンゾ環の7-、8-、および9-位に存在する、請求項60記載の化合物。

【請求項73】  $R^x$ ラジカルが、式(I)の構造のベンゾ環の7-、8-、または9-位の一つもしくはそれ以上に存在する、請求項60記載の化合物。

【請求項74】  $R^x$ ラジカルが、式(I)の構造のベンゾ環の7-、および9-位に存在する、請求項60記載の化合物。

【請求項75】  $R^x$ ラジカルが、式(I)の構造のベンゾ環の7-位に存在する、請求項60記載の化合物。

【請求項76】 一つもしくはそれ以上の $R^x$ が、 $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ からなる群より独立して選択され、 $R^{13}$ および $R^{14}$ が請求項2の定義通りである、請求項60記載の化合物。

【請求項77】  $R^{13}$ および $R^{14}$ がそれぞれメチルである、請求項76記載の化合物。

【請求項78】  $R^y$ 置換基が、式(II)のフェニル環の3-または4-位に独立して結合する、請求項60記載の化合物。

【請求項79】  $t$ が1または2である、請求項60記載の化合物。

【請求項80】  $t$ が1である、請求項60記載の化合物。

【請求項81】 以下である、請求項60記載の化合物；

式中、上記の一つもしくはそれ以上の $R^y$ が、水素；ハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-NR^{13}C(O)R^{14}$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン

; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; -OR<sup>16</sup>; -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>; -N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>; および-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、およびR<sup>w</sup>は、水素; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; アンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシヘテロシクリル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノ; およびアシルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中、A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである; ならびに

式中、R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、水素; (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; ヘテロシクリル; アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル; およびカルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より独立して選択される; または

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、それらが結合する炭素原子と共に、環状環を形成する; ならびに

式中、R<sup>16</sup>およびR<sup>17</sup>は、R<sup>9</sup>およびMからなる群より独立して選択される; ならびに;

式中、Mは薬学的に許容される陽イオンである。

【請求項82】 上記のR<sup>y</sup>が、水素、クロロ、フルオロ、ブロモ、ヨード、ヒドロキシ、メトキシ、エトキシ、ニトロ、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨー

ドメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、クロロエチルカルボニルアミノ、フルオロエチルカルボニルアミノ、ブロモエチルカルボニルアミノ、ヨードエチルカルボニルアミノ、プロピルカルボニルアミノ、クロロプロピルカルボニルアミノ、フルオロプロピルカルボニルアミノ、ブロモプロピルカルボニルアミノ、ヨードプロピルカルボニルアミノ、ブチルカルボニルアミノ、クロロブチルカルボニルアミノ、フルオロブチルカルボニルアミノ、ブロモブチルカルボニルアミノ、ヨードブチルカルボニルアミノ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、トリエチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、クロロエトキシエトキシエトキシ、フルオロエトキシエトキシエトキシ、ブロモエトキシエトキシエトキシ、ヨードエトキシエトキシエトキシ、ピリジニウムエトキシエトキシエトキシ、ピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、メチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、ジメチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、ピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、メチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシ、およびジメチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニルからなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項83】 上記の一つもしくはそれ以上のR<sub>1</sub>が、ヒドロキシ、メトキシ、エトキシ、ニトロ、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、クロロエチルカルボニルアミノ、フルオロエチルカルボニルアミノ、ブロモエチルカルボニルアミノ、ヨードエチルカルボニルアミノ、プロピルカルボニルアミノ、クロロプロピルカルボニルアミノ、フル

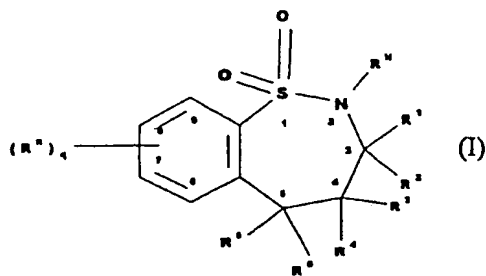
オロプロピルカルボニルアミノ、ブromoproピルカルボニルアミノ、ヨードプロピルカルボニルアミノ、ブチルカルボニルアミノ、クロロブチルカルボニルアミノ、フルオロブチルカルボニルアミノ、ブromobutiルカルボニルアミノ、ヨードブチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、トリエチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、クロロエトキシエトキシエトキシ、フルオロエトキシエトキシエトキシ、ブromoeトキシエトキシエトキシ、ヨードエトキシエトキシエトキシ、およびピリジニウムエトキシエトキシエトキシ、からなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項84】 上記の一つもしくはそれ以上のR<sup>v</sup>が、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノ、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシ、およびトリエチルアンモニウムメトキシエトキシエトキシ、からなる群より独立して選択される、請求項60記載の化合物。

【請求項85】 上記のヒドロキシ基が式(II)の上記構造とsyn関係にある、請求項60記載の化合物。

【請求項86】 式(I)の化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ：

【化3】



式中：

qは1または2である；

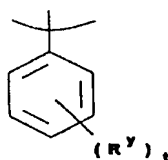
R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>はそれぞれ、独立してアルキルである；

R<sup>3</sup>はヒドロキシである；

R<sup>4</sup>およびR<sup>6</sup>は水素である；

R<sup>5</sup>は式(II)を有する：

【化4】



式中、tは0～5までの整数である；

一つもしくはそれ以上のR<sup>y</sup>は、水素；ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、R<sup>y</sup>ラジカルのアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキルおよびポリエーテル置換基は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つもし

くはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>ν</sup> ラジカル、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、および R<sup>15</sup> は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、R<sup>13</sup> および R<sup>14</sup> は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、R<sup>14</sup> および R<sup>15</sup> は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、および R<sup>15</sup> のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ；アルキル；ハロア

ルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリー  
ール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カ  
ルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$   
； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(O$   
 $R^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる  
群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；な  
らびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポ  
リアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロ  
シクリル；アリーールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルア  
ルキル；アルキルアリーールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキ  
ルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニ  
ルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテ  
ルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^{--}$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9$   
 $A^{--}$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^{--}$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残  
基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそ  
れ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ およびMからなる群より独立して選択される；なら  
びに

式中、Mは、薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は、請求項2に定義した通りである  
；ならびに

$R^N$ は、水素；アルキル；およびアラルキルからなる群より選択される；ならび  
に

一つもしくはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、アルコキシ、アルキルアミノおよびジ  
アルキルアミノからなる群より独立して選択される。

【請求項87】  $R^1$ および $R^2$ がそれぞれ同じ( $C_1-C_{10}$ )アルキルである、請  
求項86記載の化合物。

【請求項88】  $R^1$ および $R^2$ がそれぞれn-ブチルである、請求項86記載の化



合物。

【請求項 89】 一つもしくはそれ以上の $R^x$  がメトキシおよびジメチルアミノからなる群より独立して選択される、請求項86記載の化合物。

【請求項 90】  $q$  が 1 である、請求項86記載の化合物。

【請求項 91】  $q$  が 1 であって、 $R^x$  がメトキシおよびジメチルアミノからなる群より選択される、請求項86記載の化合物。

【請求項 92】  $R^N$  が、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される、請求項86記載の化合物。

【請求項 93】 上記のヒドロキシ基が式 (II) の上記構造と syn 関係にある、請求項86記載の化合物。

【請求項 94】  $t$  が 1 である、請求項86記載の化合物。

【請求項 95】  $t$  が 1 であって、 $R^y$  がパラ位に存在する、請求項86記載の化合物。

【請求項 96】  $t$  が 1 であって、 $R^y$  がメタ位に存在する、請求項86記載の化合物。

【請求項 97】 以下である、請求項86記載の化合物；

式中、一つもしくはそれ以上の $R^y$  がハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-NR^{13}C(O)R^{14}$  からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$  が、 $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C$

10) アルキルヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; およびポリエーテルラジカルが、選択的に、ハロゲン; ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; カルボキシ; カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル;  $-OR^{16}$ ;  $-NR^9 R^{10}$ ;  $-N^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ; および  $-CONR^9 R^{10}$  からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および  $R^w$  は、水素; ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ヘテロシクリル; アンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; カルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; カルボキシヘテロシクリル; カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアミノ; およびアシルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中  $A^-$  は、薬学的に許容される陰イオンである; ならびに

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素; ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; ヘテロシクリル; アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル; およびカルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される; または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する; ならびに

$R^{16}$  および  $R^{17}$  は、 $R^9$  および  $M$  からなる群より独立して選択される; ならびに

式中、 $M$  は薬学的に許容される陽イオンである。

【請求項98】 以下である、請求項97記載の化合物:

$R^1$  および  $R^2$  が、それぞれ、同じ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルである;

一つもしくはそれ以上の  $R^x$  が、メトキシおよびジメチルアミノからなる群より独立して選択される;

上記のヒドロキシ基が、式(II)の上記構造とsyn関係にある;

$t$  が1である; ならびに

$R^y$  がメタまたはパラ位に存在する。

【請求項99】  $R^1$  および  $R^2$  が、それぞれ同じ  $n$ -ブチルである、請求項97記載の化合物。

【請求項100】  $q$ が1である、請求項97記載の化合物。

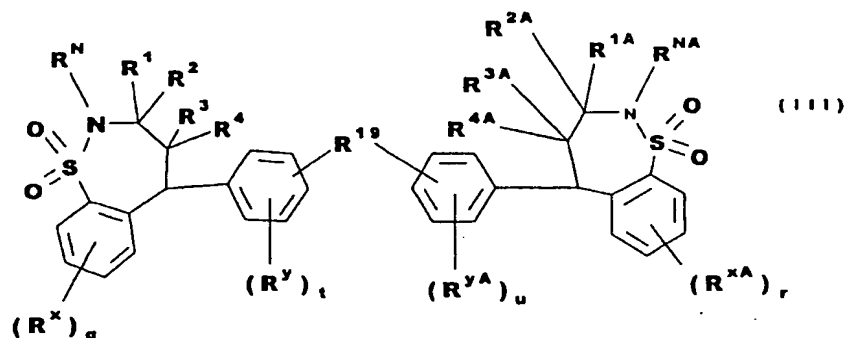
【請求項101】  $R^N$ が水素、メチル、エチルおよびベンジルからなる群より選択される、請求項97記載の化合物。

【請求項102】  $R^y$ がパラ位に存在する、請求項97記載の化合物。

【請求項103】  $R^y$ がメタ位に存在する、請求項97記載の化合物。

【請求項104】 式(III)の化合物；またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ；

【化5】



式中、

$q$ および $r$ は0～4までの独立した整数である；

$t$ および $u$ は、0～4までの独立した整数である；

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$ および $R^2$ は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキルもしくは $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルケニルを形成する；または

$R^{1A}$ および $R^{2A}$ は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキルもしくは $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルケニルを形成する；

式中 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-\text{CN}$ ；ハロゲン；オキソ； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w \text{A}^-$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w \text{A}^-$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2 \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_3 \text{R}^9$ ； $-\text{CO}_2 \text{R}^9$ ；および $-\text{CONR}^9 \text{R}^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^9-$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9 \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9-$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^9-$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、および $\text{R}^w$ は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アルキルアンモニウムアルキル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；カルボキシアリール；カルボキシヘテロシクリル；アミノ；アルキルアミノ；カルボキシアルキルアミノ；アルコキシアルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中 $\text{A}-$ は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^{3A}$ 、および $\text{R}^{4A}$ は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2 \text{R}^9$ ；および $-\text{SO}_3 \text{R}^9$ からなる群より独立して選択される；または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$  ;  $=NOR^9$  ;  $=S$  ;  $=NNR^9 R^{10}$  ;  $=NR^9$  ; または  $=CR^{11} R^{12}$  を形成する ;

$R^{3A}$  および  $R^{4A}$  は共に  $=O$  ;  $=NOR^9$  ;  $=S$  ;  $=NNR^9 R^{10}$  ;  $=NR^9$  ; または  $=CR^{11} R^{12}$  を形成する ;

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素 ;  $-CN$  ; ハロゲン ; オキソ ; アルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; カルボキシアルキル ; アルコキシアルキル ; カルボアルコキシアルキル ; シクロアルキル ; シクロアルケニル ; ハロアルキル ; ヒドロキシアルキル ; シアノアルキル ;  $-OR^9$  ;  $-NR^9 R^{10}$  ;  $-SR^9$  ;  $-S(O)R^9$  ;  $-SO_2 R^9$  ;  $-SO_3 R^9$  ;  $-CO_2 R^9$  ; および  $-CONR^9 R^{10}$  からなる群より独立して選択される ; または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する ; ならびに

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、上記の通りである ; ならびに

式中、 $R^y$  および  $R^{yA}$  は、ハロゲン ;  $-NO_2$  ;  $-CN$  ; オキソ ; アルキル ; ポリアルキル ; ハロアルキル ; ヒドロキシアルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; 四級ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; ポリエーテル ;  $-OR^{13}$  ;  $-NR^{13} R^{14}$  ;  $-SR^{13}$  ;  $-S(O)R^{13}$  ;  $-SO_2 R^{13}$  ;  $-SO_3 R^{13}$  ;  $-NR^{13} OR^{14}$  ;  $-NR^{13} NR^{14} R^{15}$  ;  $-CO_2 R^{13}$  ;  $-OM$  ;  $-SO_2 OM$  ;  $-SO_2 NR^{13} R^{14}$  ;  $-C(O)NR^{13} R^{14}$  ;  $-C(O)OM$  ;  $-COR^{13}$  ;  $-NR^{13} C(O)R^{14}$  ;  $-NR^{13} C(O)NR^{14} R^{15}$  ;  $-NR^{13} CO_2 R^{14}$  ;  $-OC(O)R^{13}$  ;  $-OC(O)NR^{13} R^{14}$  ;  $-NR^{13} SOR^{14}$  ;  $-NR^{13} SO_2 R^{14}$  ;  $-NR^{13} SONR^{14} R^{15}$  ;  $-NR^{13} SO_2 NR^{14} R^{15}$  ;  $-P(O)R^{13} R^{14}$  ;  $-PR^{13} R^{14}$  ;  $-P^+ R^{13} R^{14} R^{15} A^-$  ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$  ;  $-S^+ R^{13} R^{14} A^-$  ; および  $-N^+ R^{13} R^{14} R^{15} A^-$  からなる群より独立して選択される ; ならびに

式中、 $R^y$  および  $R^{yA}$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$  ; ハロゲン ; ヒドロキシ ; オキソ ; アルキル ; シクロアルキル ; アルケニル ; アルキニル ; アリール ; ヘテロシクリル ; アリールアルキル ; ヘテロシクリルアルキル ; 四級ヘテロシクリル ;  $-OR^7$

;  $-NR^7R^8$ ;  $-SR^7$ ;  $-S(O)R^7$ ;  $-SO_2R^7$ ;  $-SO_3R^9$ ;  $-CO_2R^7$ ;  $-CONR^7R^8$ ;  $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ;  $-P(O)R^7R^8$ ;  $-PR^7R^8$ ;  $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ; および  $-P(O)(OR^7)OR^8$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい; ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  ラジカル、ハロアルキル、ヒドロキシアリール、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ;  $-NR^7-$ ;  $-N^+R^7R^8A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^7A^-$ ;  $-PR^7-$ ;  $-P(O)R^7-$ ;  $-P^+R^7R^8A^-$ ; またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい; ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素; アルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素; アルキル; ハロアルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; 四級ヘテロシクリルアルキル; アルキルアリールアルキル; アルキルヘテロシクリルアルキル; アルキルアンモニウムアルキル; アミノカルボニルアルキル; アルキルアミノカルボニルアルキル; カルボキシアリールアミノカルボニルアルキル; およびポリエーテルからなる群より独立して選択される; または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する; または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する; ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  のアルキル; ハロアルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; 四級ヘテロシクリルアルキル; アルキルアリールアルキル; アルキルヘテロシクリルアルキル; アルキルアンモニウムアルキル; アミノカルボニルアルキル; アルキルアミノカルボニル

ルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル；-OR<sup>16</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>16</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-PO(O R<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>；-P<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>11</sup>A<sup>-</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、およびR<sup>15</sup>のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリーールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリーールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、-O-；-NR<sup>9</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>9</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-P(O)R<sup>9</sup>-；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>16</sup>およびR<sup>17</sup>は、R<sup>9</sup>およびMからなる群より独立して選択される；ならびに

nは0、1または2である；ならびに

Mは薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>w</sup>、およびA<sup>-</sup>は上記の通りである；ならびに

R<sup>n</sup>およびR<sup>nA</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アラルキル；およびヘテロシクリルアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

一つもしくはそれ以上のR<sup>x</sup>およびR<sup>xA</sup>ラジカルは、水素；ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル

；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシ；  
 ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^x$ および $R^{xA}$ のアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、ポリエーテル、およびアシルオキシ置換基は、選択的に、 $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

一つもしくはそれ以上の $R^x$ および $R^{xA}$ の四級ヘテロシクリルラジカルは、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ； $-CN$ ；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^x$ および $R^{xA}$ は、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^--$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^--$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく；ポリアルキルは選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^--$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^--$ ；または $-P(O)R^9-$ によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに



式中、 $R^{18}$ は、アルキル、アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される；ならびに

式中、 $R^{18}$ のアルキル、アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-\text{CN}$ ； $-\text{NO}_2$ ；オキソ； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{11} \text{R}^{12} \text{A}^-$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}(\text{O}) \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2 \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_3 \text{R}^9$ ； $-\text{CO}_2 \text{R}^9$ ； $-\text{CONR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{SO}_2 \text{OM}$ ； $-\text{SO}_2 \text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{PR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{P}(\text{OR}^{16}) \text{OR}^{17}$ ； $-\text{PO}(\text{OR}^{16}) \text{OR}^{17}$ ；および $-\text{C}(\text{O}) \text{OM}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、 $\text{R}^{15}$ 、 $\text{R}^{16}$ 、 $\text{R}^{17}$ 、 $\text{R}^w$ 、 $\text{A}^-$ 、および $\text{M}$ は上記の通りである；

$\text{R}^{19}$ は、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基からなる群より選択される；式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^7-$ ； $-\text{NR}^7 \text{R}^8 \text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^7 \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^7-$ ； $-\text{P}(\text{O}) \text{R}^7-$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^7 \text{R}^8 \text{A}^-$ ；フェニレン；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；またはアリールによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、アルキル；アルケニル；ポリアルキル；ポリエーテル；アリール；ハロアルキル；シクロアルキル；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ハロゲン；オキソ； $-\text{OR}^1$

$^3$  ;  $-\text{NR}^1{}^3\text{R}^1{}^4$  ;  $-\text{SR}^1{}^3$  ;  $-\text{S}(\text{O})\text{R}^1{}^3$  ;  $-\text{SO}_2\text{R}^1{}^3$  ;  $-\text{SO}_3\text{R}^1{}^3$  ;  $-\text{NR}^1{}^3\text{OR}^1{}^4$  ;  $-\text{NR}^1{}^3\text{NR}^1{}^4\text{R}^1{}^5$  ;  $-\text{NO}_2$  ;  $-\text{CO}_2\text{R}^1{}^3$  ;  $-\text{CN}$  ;  $-\text{OM}$  ;  $-\text{SO}_2\text{OM}$  ;  $-\text{SO}_2\text{NR}^1{}^3\text{R}^1{}^4$  ;  $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1{}^3\text{R}^1{}^4$  ;  $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$  ;  $-\text{COR}^1{}^3$  ;  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^1{}^3\text{R}^1{}^4$  ;  $-\text{PR}^1{}^3\text{R}^1{}^4$  ;  $-\text{P}^+\text{R}^1{}^3\text{R}^1{}^4\text{R}^1{}^5\text{A}^-$  ;  $-\text{P}(\text{OR}^1{}^3)\text{OR}^1{}^4$  ;  $-\text{S}^+\text{R}^1{}^3\text{R}^1{}^4\text{A}^-$  ; および  $-\text{N}^+\text{R}^1{}^3\text{R}^1{}^4\text{R}^1{}^5\text{A}^-$  からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換しうる ;

式中、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^1{}^1$ 、 $\text{R}^1{}^2$ 、 $\text{R}^1{}^3$ 、 $\text{R}^1{}^4$ 、 $\text{R}^1{}^5$ 、および  $\text{A}^-$  は上記の通りである。

【請求項105】  $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^1{}^A$ 、 $\text{R}^2$ 、および  $\text{R}^2{}^A$  が、水素およびアルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項106】  $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^1{}^A$ 、 $\text{R}^2$ 、および  $\text{R}^2{}^A$  が、水素および  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項107】  $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^1{}^A$ 、 $\text{R}^2$ 、および  $\text{R}^2{}^A$  が、水素および  $\text{C}_2$ - $\text{C}_7$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項108】  $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^1{}^A$ 、 $\text{R}^2$ 、および  $\text{R}^2{}^A$  が、 $\text{C}_2$ - $\text{C}_4$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項109】  $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^1{}^A$ 、 $\text{R}^2$ 、および  $\text{R}^2{}^A$  が、エチル ;  $n$ -プロピル ;  $n$ -ブチル ; およびイソブチルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項110】  $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^3{}^A$ 、 $\text{R}^4$ 、および  $\text{R}^4{}^A$  が水素、および  $-\text{OR}^9$  からなる群より独立して選択され、式中  $\text{R}^9$  が請求項104に記載の通りである、請求項104記載の化合物。

【請求項111】  $\text{R}^9$  が水素である、請求項110記載の化合物。

【請求項112】  $\text{R}^N$ 、および  $\text{R}^N{}^A$  が、水素、アルキル、およびアラルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項113】  $\text{R}^N$ 、および  $\text{R}^N{}^A$  が、水素、( $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ ) アルキル、およびアリール ( $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項114】  $\text{R}^N$ 、および  $\text{R}^N{}^A$  が、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物。

【請求項115】 一つもしくはそれ以上の  $\text{R}^x$  および  $\text{R}^x{}^A$  が、メトキシおよ

びジメチルアミノからなる群より独立して選択される、請求項104記載の化合物

。

【請求項116】  $q$ および $r$ がそれぞれ1である、請求項104記載の化合物

。

【請求項117】 以下である、請求項104記載の化合物；

一つもしくはそれ以上の $R^v$ がハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}-$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)R^{14}$ からなる群より独立して選択される；ならびに

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ が、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルラジカルが、選択的に、ハロゲン； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換されてもよい；ならびに

$R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^w$ が、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；アンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボ $(C_1-C_{10})$ アルコキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキルアミノ；およびアシル

からなる群より独立して選択される；ならびに

A<sup>-</sup>が薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>が水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；ヘテロシクリル；アリール(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；カルボキシ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；およびカルボ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルコキシ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキルからなる群より独立して選択される；または

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>はそれらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；

R<sup>16</sup>およびR<sup>17</sup>はR<sup>9</sup>およびMからなる群より独立して選択される；ならびに

Mは薬学的に許容される陽イオンである。

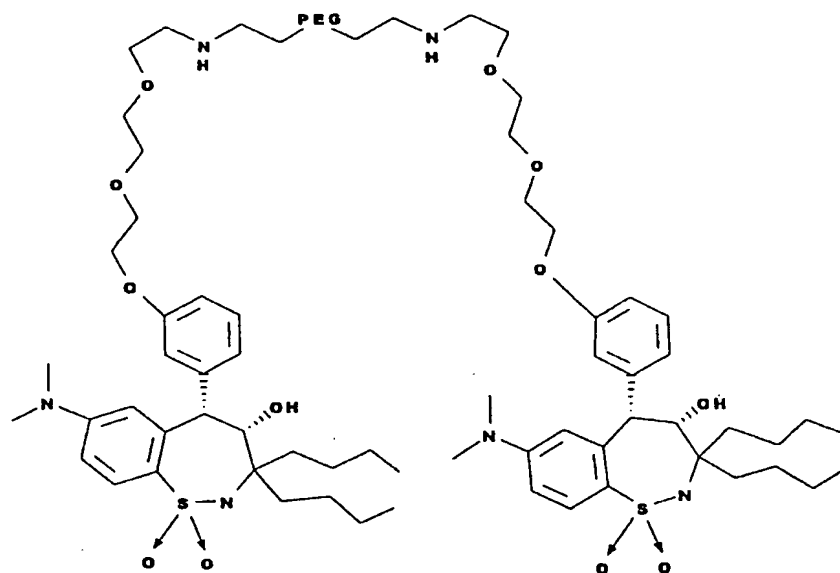
【請求項118】 以下である、請求項104記載の化合物：

R<sup>19</sup>が、アルカンジイル；ポリアルカンジイル；アルコキシジイル；およびポリアルコキシジイルからなる群より選択され；アルカンジイルおよびポリアルカンジイルが、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく、R<sup>7</sup>およびR<sup>8</sup>が請求項104に定義の通りである。

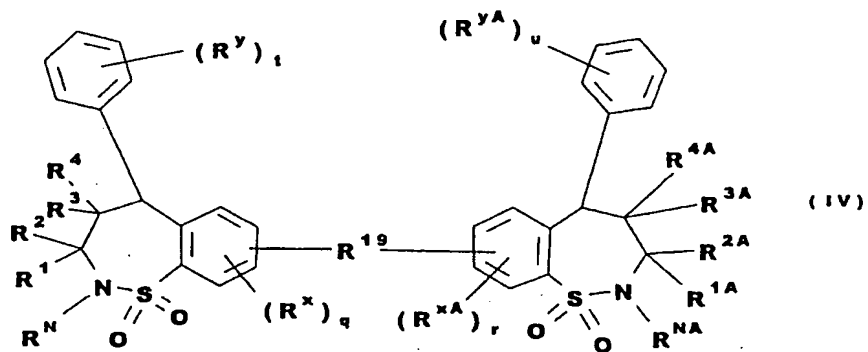
【請求項119】 R<sup>19</sup>が、一つもしくはそれ以上の炭素原子が選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；またはポリアルキルによって置換されるアルコキシジイルおよびポリアルカンジイルからなる群より選択され；R<sup>7</sup>およびR<sup>8</sup>が請求項104に定義の通りである、請求項104記載の化合物。

【請求項120】 以下の式を有する請求項104記載の化合物。

【化6】



【化7】



R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>1A</sup>およびR<sup>2A</sup>は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリー

ルオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルまたは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する；

$R^{1A}$  および  $R^{2A}$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルまたは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する；

式中  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-\text{CN}$ ；ハロゲン；オキソ； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w \text{A}^-$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w \text{A}^-$ ； $-\text{S}(\text{O}) \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2 \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_3 \text{R}^9$ ； $-\text{CO}_2 \text{R}^9$ ；および  $-\text{CONR}^9 \text{R}^{10}$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^9-$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9 \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9-$ ； $-\text{P}(\text{O}) \text{R}^9-$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

$\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、および  $\text{R}^w$  は、独立して水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アルキルアンモニウムアルキル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシ

アルキル；カルボアルコキシアルキル；カルボキシアリール；カルボキシヘテロシクリル；アミノ；アルキルアミノ；カルボキシアルキルアミノ；アルコキシアルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>3A</sup>、およびR<sup>4A</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>は共に、=O；=NOR<sup>9</sup>；=S；=NNR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；=NR<sup>9</sup>；または=CR<sup>11</sup>R<sup>12</sup>を形成する；

R<sup>3A</sup>およびR<sup>4A</sup>は共に、=O；=NOR<sup>9</sup>；=S；=NNR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；=NR<sup>9</sup>；または=CR<sup>11</sup>R<sup>12</sup>を形成する；

式中、R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、水素；-CN；ハロゲン；オキソ；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；シクロアルキル；シクロアルケニル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シアノアルキル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、上記の通りである；ならびに

式中、R<sup>v</sup>およびR<sup>vA</sup>は、水素；ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択され

る；ならびに

式中、 $R^y$  および  $R^yA$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアリル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および  $-P(O)(OR^7)OR^8$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；および

式中、 $R^y$  および  $R^yA$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアリル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される単環式、または多環式ヘテロシクリルを形成する；または



式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(O R^{16})OR^{17}$ ； $-PR^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ およびMからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、Mは薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $n$ は、0、1または2である；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は上記の通りである；ならびに

$R^N$ および $R^{NA}$ は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アラルキル；およびヘテロシクリルアルキルからなる群より独立して選択される；

一つもしくはそれ以上の $R^x$ および $R^{xA}$ ラジカルは、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}$ ； $R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-SO_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^x$ および $R^{xA}$ のアルキル、シクロアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、ポリエーテル、およびアシルオキシラジカルは、選択的に、 $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、一つもしくはそれ以上の $R^x$ および $R^{xA}$ の四級ヘテロシクリルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される一つも

しくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^x$  および  $R^{xA}$  は、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^-$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく；上記のフェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；およびポリアルキルは選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ；または $-P(O)R^9-$ によって置換した一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{18}$  は、アルキル、アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される；ならびに

式中、 $R^{18}$  のアルキル、アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ；および $-C(O)OM$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および $M$ は上記の通りである；ならびに

$R^{19}$  が、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素、アミノ酸、ペプチド、およびポリペプチドからなる群より選択される；式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR$

7-;  $-N^+R^7R^8A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^7A^-$ ;  $-PR^7-$ ;  $-P(O)R^7-$ ;  $-P^+R^7R^8A^-$ ; フェニレン; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; またはアリールによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい; ならびに

式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、アルキル; アルケニル; ポリアルキル; ポリエーテル; アリール; ハロアルキル; シクロアルキル; ヘテロシクリル; アリールアルキル; ハロゲン; オキソ;  $-OR^{13}$ ;  $-NR^{13}R^{14}$ ;  $-SR^{13}$ ;  $-S(O)R^{13}$ ;  $-SO_2R^{13}$ ;  $-SO_3R^{13}$ ;  $-NR^{13}OR^{14}$ ;  $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ;  $-NO_2$ ;  $-CO_2R^{13}$ ;  $-CN$ ;  $-OM$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)OM$ ;  $-COR^{13}$ ;  $-P(O)R^{13}R^{14}$ ;  $-PR^{13}R^{14}$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$ ;  $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ; および  $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$  からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換しうる;

式中、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、および  $A^-$  は、上記の通りである。

【請求項122】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  が、水素およびアルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項123】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  が、水素および  $C_1-C_{10}$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項124】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  が、 $C_2-C_7$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項125】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  が、 $C_2-C_4$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項126】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$  および  $R^{2A}$  が、エチル;  $n$ -プロピル;  $n$ -ブチル; およびイソブチルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項127】  $R^3$ 、 $R^{3A}$ 、 $R^4$  および  $R^{4A}$  が、水素および  $-OR^9$  からなる群より独立して選択され、 $R^9$  が請求項121に定義の通りである、請求項121記載の化合物。

【請求項128】  $R^9$  が水素である、請求項126記載の化合物。

【請求項129】  $R^N$  および  $R^{NA}$  が、水素、アルキル、およびアラルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項130】  $R^N$  および  $R^{NA}$  が、水素、 $(C_1-C_{10})$  アルキル、およびアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項131】  $R^N$  および  $R^{NA}$  が、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項132】 一つもしくはそれ以上の  $R^x$  および  $R^{xA}$  が、メトキシおよびジメチルアミノからなる群より独立して選択される、請求項121記載の化合物。

【請求項133】  $q$  および  $r$  がそれぞれ1である、請求項121記載の化合物。

【請求項134】 以下である、請求項121記載の化合物；

一つもしくはそれ以上の  $R^y$  がハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)R^{14}$  からなる群より独立して選択される；ならびに

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  が、水素； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルは、選択的に、ハロゲン； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$

アルキル；カルボキシ；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

$R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^w$ が、水素；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；アンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

$A^-$  が薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$R^{11}$  および  $R^{12}$  が水素；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；およびカルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  はそれらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；

$R^{16}$  および  $R^{17}$  は、 $R^9$  および  $M$  からなる群より独立して選択される；ならびに  $M$  は薬学的に許容される陽イオンである。

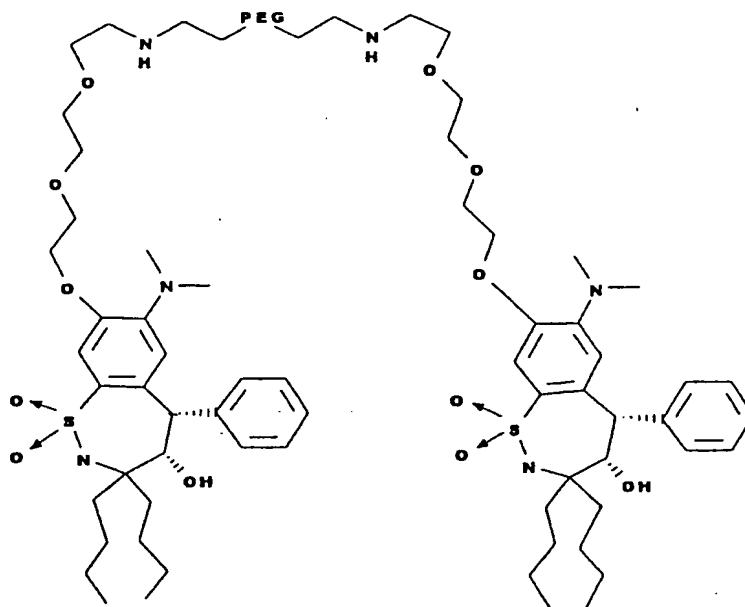
【請求項135】 以下である、請求項121記載の化合物：

$R^{19}$  が、アルカンジイル；ポリアルカンジイル；アルコキシジイル；およびポリアルコキシジイルからなる群より選択されて；アルカンジイルおよびポリアルカンジイルが、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有しえて、 $R^7$  および  $R^8$  が請求項121に定義の通りである。

【請求項136】  $R^{19}$  が、一つもしくはそれ以上の炭素が、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；またはポリアルキルによって置換される、アルコキシジイルおよびポリアルコキシジイルからなる群より選択され、 $R^9$  および  $R^{10}$  が請求項121に定義の通りである、請求項121記載の化合物。

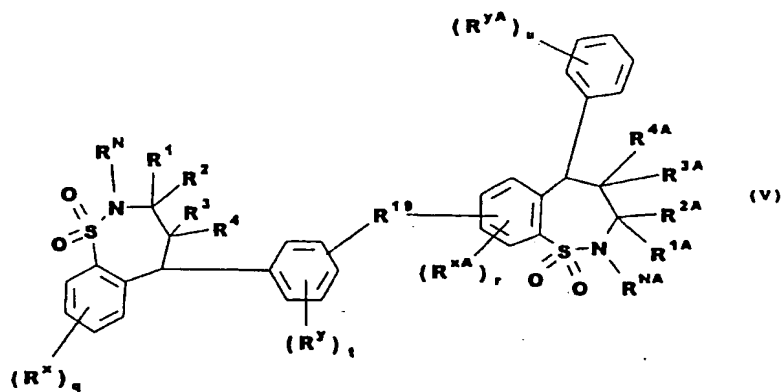
【請求項137】 以下の構造式を有する請求項121記載の化合物。

【化8】



【請求項138】 式(V)の化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグ：

【化9】



式中：

qは0～4までの整数である；

rは0～3までの整数である；

tは0～4までの整数である；

uは0～5までの整数である；

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルもしくは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する；

$R^{1A}$  および  $R^{2A}$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルもしくは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する；

式中 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9 R^{10}$ ； $-N^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ； $-SR^9$ ； $-S^+ R^9 R^{10} A^-$ ； $-P^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ； $-PR^9 R^{10}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2 R^9$ ； $-SO_3 R^9$ ； $-CO_2 R^9$ ；および $-CONR^9 R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル



) アリールラジカルは、選択的に、 $-O-$ ;  $-NR^9-$ ;  $-N^+R^9R^{10}A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^9A^-$ ;  $-PR^9-$ ;  $-P(O)R^9-$ ;  $-P^+R^9R^{10}A^-$ ; またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい; ならびに

$R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^*$ は、水素; アルキル; シクロアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; アルキルアンモニウムアルキル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; カルボキシアルキル; アルコキシアルキル; カルボアルコキシアルキル; カルボキシアリール; カルボキシヘテロシクリル; アミノ; アルキルアミノ; カルボキシアルキルアミノ; アルコキシアルキルアミノ; およびアシルからなる群より独立して選択される; ならびに

式中 $A^-$ は、薬学的に許容される陰イオンである; および

$R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^3A$ 、および $R^4A$ は、水素; アルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ; および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される; または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$ ;  $=NOR^9$ ;  $=S$ ;  $=NNR^9R^{10}$ ;  $=NR^9$ ; もしくは  $=CR^{11}R^{12}$  を形成する;

$R^3A$  および  $R^4A$  は共に、 $=O$ ;  $=NOR^9$ ;  $=S$ ;  $=NNR^9R^{10}$ ;  $=NR^9$ ; もしくは  $=CR^{11}R^{12}$  を形成する;

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素;  $-CN$ ; ハロゲン; オキソ; アルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; カルボキシアルキル; アルコキシアルキル; カルボアルコキシアルキル; シクロアルキル; シクロアルケニル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; シアノアルキル;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ;  $-SO_3R^9$ ;  $-CO_2R^9$ ; および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より独立して選択される; または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する; ならびに

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、上記の通りである; および

一つもしくはそれ以上の $R^9$  および  $R^9A$  は、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ; オキソ; アルキル; ポリアルキル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; シクロアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリ

ールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-NR^{13}C(O)R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)NR^{14}R^{15}$ ； $-NR^{13}CO_2R^{14}$ ； $-OC(O)R^{13}$ ； $-OC(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}SOR^{14}$ ； $-NR^{13}SO_2R^{14}$ ； $-NR^{13}SONR^{14}R^{15}$ ； $-NR^{13}SO_2NR^{14}R^{15}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ；および $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^y$  および  $R^yA$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアリル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および $-P(O)(OR^7)OR^8$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^y$  および  $R^yA$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアリル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノ

カルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-P(O)(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9$

$A^-$ ;  $-PR^9-$ ;  $-P^+R^9R^{10}A^-$ ;  $-P(O)R^9-$ ; フェニレン; 炭化水素残基; アミノ酸残基; ペプチド残基; またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい; ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される; ならびに

式中、 $M$ は薬学的に許容される陽イオンである; および

式中、 $n$ は0、1、または2である; ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は上記の通りである; ならびに

$R^N$ および $R^{NA}$ は、水素; アルキル; アルケニル; アルキニル; アラルキル; およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される; ならびに

一つもしくはそれ以上の $R^x$ および $R^{xA}$ ラジカルは、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ; アルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; ポリエーテル; アシルオキシ;  $-OR^{13}$ ;  $-NR^{13}R^{14}$ ;  $-SR^{13}$ ;  $-S(O)R^{13}$ ;  $-SO_2R^{13}$ ;  $-SO_3R^{13}$ ;  $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ;  $-NR^{13}OR^{14}$ ;  $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ;  $-CO_2R^{13}$ ;  $-OM$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ;  $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ;  $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)OM$ ;  $-COR^{13}$ ;  $-OR^{18}$ ;  $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ;  $-NR^{13}R^{18}$ ;  $-NR^{18}OR^{14}$ ;  $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ;  $-PR^{13}R^{14}$ ;  $-P(O)R^{13}R^{14}$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ; アミノ酸残基; ペプチド残基; ポリペプチド残基; および炭化水素残基からなる群より独立して選択される; ならびに

式中、 $R^x$ および $R^{xA}$ のアルキル、シクロアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、ポリエーテル、およびアシルオキシラジカルは、選択的に、 $-CN$ ; オキシ;  $-OR^{16}$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ;  $-SR^{16}$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ;  $-SO_3R^{16}$ ;  $-CO_2R^{16}$ ;  $-CONR^9R^{10}$ ;  $-SO_2NR^9R^{10}$ ;  $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ;  $-P^9R^{10}$ ;  $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ;  $-S^+R^9R^{10}A^-$ ; および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい; ならびに

式中、 $R^x$ および $R^{xA}$ の四級ヘテロシクリルラジカルは、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ;

-CN; オキソ; アルキル; シクロアルキル; ポリアルキル; ハロアルキル; ヒドロキシアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; ポリエーテル;  $-OR^{13}$ ;  $-NR^{13}R^{14}$ ;  $-SR^{13}$ ;  $-S(O)R^{13}$ ;  $-SO_2R^{13}$ ;  $-SO_3R^{13}$ ;  $-NR^{13}OR^{14}$ ;  $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ;  $-CO_2R^{13}$ ;  $-OM$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ;  $-C(O)OM$ ;  $-COR^{13}$ ;  $-P(O)R^{13}R^{14}$ ;  $-PR^{13}R^{14}$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ;  $-P(OR^{13})OR^{14}$ ;  $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ;  $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ; および炭化水素残基からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい;

式中、 $R^x$  および  $R^{xA}$  ラジカルは、 $-O-$ ;  $-NR^{13}-$ ;  $-N^+R^{13}R^{14}A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^{13}A^-$ ;  $-PR^{13}-$ ;  $-P(O)R^{13}-$ ;  $-P^+R^{13}R^{14}A^-$ ; フェニレン; アミノ酸残基; ペプチド残基; ポリペプチド残基; 炭化水素残基; ポリエーテル; またはポリアルキルによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよく; 上記のフェニレン; アミノ酸残基; ペプチド残基; ポリペプチド残基; 炭化水素残基; およびポリアルキルは選択的に、 $-O-$ ;  $-NR^9-$ ;  $-N^+R^9R^{10}A^-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-S^+R^9A^-$ ;  $-PR^9-$ ;  $-P^+R^9R^{10}A^-$ ; または  $-P(O)R^9$  によって置換した一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい; ならびに

式中、 $R^{18}$  は、アルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; アシル; アルコキシカルボニル; アリールアルコキシカルボニル; およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される; ならびに

式中、 $R^{18}$  のアルキル; アルケニル; アルキニル; アリール; ヘテロシクリル; 四級ヘテロシクリル; アリールアルキル; ヘテロシクリルアルキル; アシル; アルコキシカルボニル; アリールアルコキシカルボニル; およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン;  $-CN$ ;  $-NO_2$ ; オキソ;  $-OR^9$ ;  $-NR^9R^{10}$ ;  $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ;  $-SR^9$ ;  $-S(O)R^9$ ;  $-SO_2R^9$ ;  $-SO_3R^9$ ;  $-CO_2R^9$ ;  $-CONR^9R^{10}$ ;  $-SO_2OM$ ;  $-SO_2NR^9R^{10}$ ;  $-PR^9R^{10}$ ;  $-P(OR^{16})OR^{17}$ ;  $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ; および  $-C(O)OM$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい; ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および  $M$  は上

記の通りである；

$R^{19}$ が、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基からなる群より選択される；式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-N^+R^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；フェニレン；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；またはアリールによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有しうる；

式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、アルキル；アルケニル；ポリアルキル；ポリエーテル；アリール；ハロアルキル；シクロアルキル；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ハロゲン；オキソ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-NO_2$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-CN$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ；および $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上の置換基によって置換しうる；

式中、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、および $A^-$ は、上記の通りである。

【請求項139】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ が、水素およびアルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項140】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ が、水素および $C_1$ - $C_{10}$ アルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項141】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ が、 $C_2$ - $C_7$ アルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項142】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ が、 $C_2$ - $C_4$ アルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項143】  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^{1A}$ および $R^{2A}$ が、エチル； $n$ -プロピル； $n$ -ブチル；およびイソブチルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項144】  $R^3$ 、 $R^{3A}$ 、 $R^4$ および $R^{4A}$ が、水素および $-OR^9$ からなる群より独立して選択され、 $R^9$ が請求項121に定義の通りである、請求項138記載の化合物。

【請求項145】  $R^9$ が水素である、請求項144記載の化合物。

【請求項146】  $R^N$ および $R^{NA}$ が、水素、アルキル、およびアラルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項147】  $R^N$ および $R^{NA}$ が、水素、 $(C_1-C_{10})$ アルキル、およびアリール $(C_1-C_{10})$ アルキルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項148】  $R^N$ および $R^{NA}$ が、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項149】 一つもしくはそれ以上の $R^*$ および $R^{*A}$ が、メトキシおよびジメチルアミノからなる群より独立して選択される、請求項138記載の化合物。

【請求項150】  $q$ および $r$ がそれぞれ1である、請求項138記載の化合物。

【請求項151】 以下である、請求項138記載の化合物；

一つもしくはそれ以上の $R^v$ が、ハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および $-NR^{13}C(O)R^{14}$ からなる群より選択される；ならびに

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ が、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択さ

れる；または

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ハロ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；四級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9 R^{10}$ ； $-N^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ；および $-CONR^9 R^{10}$ からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

$R^9$ 、および $R^{10}$ が、水素；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；アンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

$A^-$ が薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$R^{11}$ および $R^{12}$ が、水素；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；およびカルボ ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$ および $R^{12}$ は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；

$R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

$M$ は薬学的に許容される陽イオンである。

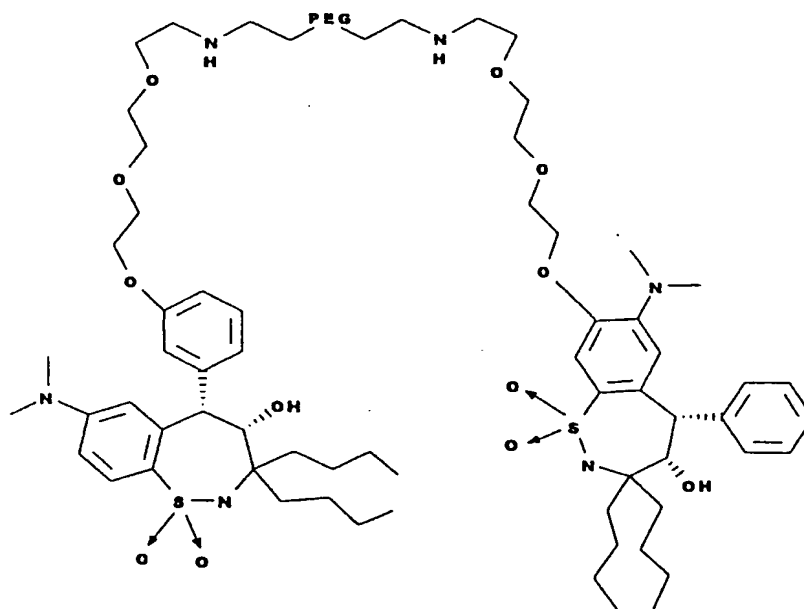
【請求項152】  $R^{19}$ が、アルカンジイル；ポリアルカンジイル；アルコキシジイル；およびポリアルコキシジイルからなる群より選択されて；アルカンジイルおよびポリアルカンジイルが、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7 R^8 A--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+ R^7 A--$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+ R^7 R^8 A--$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有しえて、 $R^7$ および $R^8$ が請求項138に定義の通りである、請求項138記載の化合物。



【請求項153】  $R^{19}$ が、一つもしくはそれ以上の炭素が、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A--$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A--$ ；フェニレン；アミノ酸；ペプチド；ポリペプチド；炭化水素；またはポリアルキルによって置換される、アルコキシジイルおよびポリアルコキシジイルからなる群より選択され、 $R^9$ および $R^{10}$ が請求項138に定義の通りである、請求項138記載の化合物。

【請求項154】 以下の式を有する請求項138記載の化合物。

【化10】



【請求項155】 請求項1の式(I)の化合物の抗高脂血症有効量；および薬学的に許容される担体を含む薬学的組成物。

【請求項156】 請求項1の式(I)の化合物の抗アテローム性動脈硬化症有効量；および薬学的に許容される担体を含む薬学的組成物。

【請求項157】 請求項1の式(I)の化合物の抗高コレステロール血症有効量；および薬学的に許容される担体を含む、薬学的組成物。

【請求項158】 請求項2の式(I)の化合物の抗高脂血症有効量；および薬学的に許容される担体を含む薬学的組成物。

【請求項159】 請求項2の式(I)の化合物の抗アテローム性動脈硬化

症有効量；および薬学的に許容される担体を含む薬学的組成物。

【請求項160】 請求項2の式(I)の化合物の抗高コレステロール血症有効量；および薬学的に許容される担体を含む、薬学的組成物。

【請求項161】 請求項155記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、高脂血症病態の予防または治療方法。

【請求項162】 請求項156記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、アテローム性動脈硬化症病態の予防または治療方法。

【請求項163】 請求項157記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、高コレステロール血症病態の予防または治療方法。

【請求項164】 請求項158記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、高脂血症病態の予防または治療方法。

【請求項165】 請求項159記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、アテローム性動脈硬化症病態の予防または治療方法。

【請求項166】 請求項160記載の組成物の単位投与剤形を、それを必要とする患者に投与する段階を含む、高コレステロール血症病態の予防または治療方法。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

発明の分野

本発明は、新規1,2-ベンゾチアゼピン、その誘導体および類似体、それらを含む薬学的組成物、ならびに医学でのその用途、特に哺乳類におけるアテローム性動脈硬化症および／または高コレステロール血症に関連した疾患のような、高脂血症疾患、病態および／または障害の予防および／または治療における用途に関する。

## 【0002】

関連技術分野の説明

総コレステロールおよび低密度リポタンパク質（「LDL」）コレステロールの濃度上昇に関連した高脂血症病態は、冠血管心疾患および特にアテローム性動脈硬化症の主な危険因子である。胆汁酸の腸管内腔内循環の妨害が、因果関係において血清コレステロールレベルを低下させることが判明している。そのような低下によって、アテローム性動脈硬化症の疾患状態が改善することを示す疫学的データが蓄積されている。ステドロンスキー（Stedronsky、「コレステロール抑制作用を有する非全身薬剤と胆汁酸およびコレステロールとの相互作用（Interaction Of Bile Acids And Cholesterol With Nonsystemic Agents Having Hypocholesterolemic Properties）」、Biochimica et Biophysica Acta. 1210 (1994) 255～287）は、胆汁酸とコレステロールに関係する生化学、生理学、および既知の活性物質について考察している。

## 【0003】

病理生理学的変化は、ヒュービラ（Heubi, J.E.、「原発性胆汁酸吸収不良：インビトロ回腸胆汁酸能動輸送の欠損（Primary Bile Acid Malabsorption: Defective In Vitro Ileal Active Bile Acid Transport）」、Gastroenterology 1982: 83: 804～11）において、ヒトにおける胆汁酸の腸肝循環の中断と一致することが示されている。

## 【0004】

実際に、コレスチラミンは、腸管において胆汁酸に結合し、それによって正常

な腸肝循環を妨害する。レイナーら (Reihner, E, 「ヒトにおける肝コレステロール代謝の調節：胆石患者におけるHMG-CoAレダクターゼ活性および低密度リポタンパク質受容体発現に及ぼすコレステラミンの作用 (Regulation of Hepatic Cholesterol Metabolism in Humans: Stimulatory Effects Of Cholestyramine On HMG-CoA Reductase Activity And Low Density-Lipoprotein Receptor Expression In Gallstone Patients)」、Journal of Lipid Research 31、1990、2219～2226)。これによって、コレステロールを用いた肝臓による肝胆汁酸合成の増加と共に、コレステロールのクリアランスを増強して血清LDLコレステロールレベルを減少させる肝LDL受容体のアップレギュレーションが起こる。サックリングら (Suckling, 「コレステラミン処置を行ったハムスターにおけるコレステロールの低下と胆汁酸排泄 (Cholesterol Lowering And Bile Acid Excretion In The Hamster With Cholestyramine Treatment)」、Atherosclerosis 89 (1991)、183～190) も同様に、血清コレステロールレベルを低下させるコレステラミン処置の結果を開示する。

#### 【0005】

胆汁酸の再循環の減少に対するもう一つのアプローチにおいて、回腸胆汁酸輸送系は、特異的輸送阻害剤による腸肝循環の妨害に基づく高コレステロール血症治療の推定薬学的標的である。クレイマーら (Kramer, 「腸の胆汁酸吸収 (Intestinal Bile Acid Absorption)」、The Journal of Biological Chemistry 第268巻、24号、8月25日発行、18035～18046頁、1993年)。

#### 【0006】

一連の特許出願において、ヘキスト株式会社は、胆汁酸を含む腸肝循環系の様々な天然に存在する成分のポリマーおよびその誘導体を開示しており、それらは生理的な胆汁酸輸送を阻害するが、それらのLDLコレステロールレベルを低下させる目標は薬剤として十分に有効であり、特にコレステロール低下剤としての用途に十分である。例えば、カナダ特許出願第2,025,294号；第2,078,588号；第2,085,782号；および第2,085,830号；ならびに欧州特許出願第0 379 161号；第0 549 967号；第0 559 064号；および第0 563 731号を参照のこと。

#### 【0007】

インビトロ胆汁酸輸送阻害剤は、「脂質低下ベンゾチエピン化合物」に関する国際公開公報第93/16055号のウェルカムファウンデーションリミテッド社の開示において、脂質低下活性を有することが開示されている。

【0008】

選択されたベンゾチエピンは、国際公開公報第93/321146号において、脂肪酸代謝および冠血管疾患を含む様々な用途に関して開示されている。

【0009】

脂質低下剤として用いられるさらなるベンゾチエピンは、国際公開公報第97/33882および米国特許第5,994,391号に開示されている。

【0010】

その他の選択されたベンゾチエピンはまた、欧州特許第508425号、FR第2661676号、ならびに国際公開公報第92/18462号によって開示され、そのそれぞれは、ベンゾチエピン融合二員環のフェニル環に隣接する炭素とのアミド結合によって制限されている。

【0011】

1996年5月30日に公表された国際公開公報第96/16051号には、特定の1,5-ベンゾチアゼピンが高脂血症病態の治療において有用であると記載されている。

【0012】

1996年2月22日に公表された国際公開公報第96/05188号には、特定の1,4-ベンゾチアゼピンが高脂血症病態の治療において有用であると記載されている。

【0013】

さらなるベンゾチアゼピンは、以下を参考として考察される。これらの参照は、特殊な用途を開示せず、または本発明と異なる用途を開示しない。

【0014】

オラホバツら (Orahovats, 「7員環スルホンアミドから10員環スルホンアミド誘導体への環拡大 (A Ring Enlargement From Seven- To Ten-Membered-Ring Sulfonamide Derivatives)」、Helv. Chim. Acta. 79, 1121~1128 (1996)) は、4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン-1,1-ジオキシドを記載している。

## 【0015】

カトリツキーら (Katrizky, 「塩化 $\omega$ フェニルアルカンスルファモイルのフリーデル・クラフツ環状化による6、7、および8員環スルタムの調製 (Preparation Of 6-, 7-, and 8-Membered Sultams By Friedel-Crafts Cyclization Of  $\omega$ -Phenylalkanesulfamoyl Chlorides)」, Org. Prep. Proced. Int. 24(4)、463～467頁 (1992) ) は、抗痙攣剤、利尿剤または鎮静剤としての可能性がある用途に関して、2,3,4,5-テトラヒドロ-1,2-ベンゾチアゼピン-1,1-ジオキシドおよび2,3,4,5-テトラヒドロ-2-ブチル-1,2-ベンゾチアゼピン-1,1-ジオキシドを記載している。

## 【0016】

ベックウィズら (Beckwith, 「アリアルラジカル環閉鎖を伴うアレーンジアゾニウム塩のヨウ素脱ジアゾニウム化 (IododediazoniatioN Of Arenediazonium Salts Accompanied By Aryl Radical Ring Closure)」, J. Org. Chem. 52、1922～1930 (1987) ) は、2,3,4,5-テトラヒドロ-2-アリル-1,2-ベンゾチアゼピン-1,1-ジオキシドを記載する。

## 【0017】

スタッシノポローら (Stassinopolou, 「ベンゾチアゼピン、ベンゾチアゾンおよびベンゾスルホンアミドN-置換誘導体の $^{13}\text{C}$  NMRスペクトル ( $^{13}\text{C}$  NMR Spectra Of Benzothiazepine, Benzothiazone, and Benzosulphonamide N-substituted Derivatives)」, Org. Magn. Reson. 21(3)、187～189頁 (1983) ) は、特定のN-置換4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン-1,1-ジオキシドを記載する。

## 【0018】

タムラら (Tamura, 「スルフィミド中間体を經由するベンゾ[b]チオフェン-3(2H)-オンの1,2-ベンズイソチアゾールおよびテトラヒドロ-1,2-ベンゾチアゼピン-5-オン系への新規変換 (Novel Conversion Of Benzo[b]thiophen-3(2H)-ones Into 1,2-Benzisothiazole And Tetrahydro-1,2-Benzothiazepine-5-One Systems Via Sulphimide Intermediates)」, J. Chem. Soc. Perkin. Trans. I、第12巻、2830～2834頁 (1980) ) は、2,3,4,5-テトラヒドロ-2-トシル-4-メチル-1,2-

-ベンゾチアゼピン-5-オン-1,1-ジオキシドを記載している。

#### 【0019】

カトソウラコスら (Catsoulacos, 「いくつかのN-置換4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシドの合成 (Synthesis Of Some N-Substituted 4,5-Dihydro-7,8-dimethoxybenzothiazepin-3-one 1,1-Dioxides)」、J. Hetero. Chem. 第13(6)巻、1309~1314頁 (1976) ) は、抗炎症活性および中枢神経系活性を有する4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン-1,1-ジオキシドおよび特定の4,5-ジヒドロ-2-(フェニル、置換フェニルまたはピリジル)-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン-1,1-ジオキシドを記載する。

#### 【0020】

パンギオトポウロスら (Pangiotopoulos, 「N(p-ブロモフェニル)-4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシド  $C_{17}H_{16}BrNO_5S$ 」、Cryst. Struct. Comm.、第9巻、313~320頁 (1980) ) は、4,5-ジヒドロ-2-(4-ブロモフェニル)-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシドを記載している。

#### 【0021】

カトソウラコスら (Catsoulacos, 「チアゾ化合物。4,5-ジヒドロ-7,8-ジメトキシベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシドの誘導体 (Thiazo Compounds. Derivatives Of 4,5-dihydro-7,8-Dimethoxybenzothiazepin-3-one 1,1-Dioxides)」、J. Chem. Eng. Data、第22(3)巻、353~354頁 (1977) ) は、4,5-ジヒドロ-2-(エチル、n-プロピル、またはイソプロピル)-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシドを記載している。

#### 【0022】

カモウチスら (Camoutsis, 「N-置換4,5-ジヒドロ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシド (N-Substituted 4,5-Dihydro-1,2-benzothiazepin-3-one 1,1-Dioxide)」、J. Hetero. Chem. 第17(5)号、1135~1136頁 (1980) ) は、特定の4,5-ジヒドロ-2-(3-または5-ピリジル)-7,8-ジメトキシ-1,2-ベンゾチアゼピン-3-オン1,1-ジオキシドを記載している。

## 【0023】

米国特許第5,350,761号は、特定のベンゾチアゼピン化合物を一般的に含むヒドロキシルアミン誘導体を記載する。これらの誘導体は、炎症およびアレルギー疾患の治療において有用なリポキシゲナーゼ阻害剤として記載されている。

## 【0024】

1998年1月22日に公表された国際公開公報第98/02432号には、特定の5-(アリアル(N-含有ヘテロシクリル)アルキル)ベンゾチアゼピンおよびアラルキル-(N-含有ヘテロシクリル)アルキル)ベンゾチアゼピンが排尿制御に有用であると記載されている。

## 【0025】

1997年2月6日に公表された国際公開公報第97/03953号には、酵素シクロオキシゲナーゼIIの阻害剤として特定のスルホニルアミノ置換ベンゾチアゼピンが記載されている。

## 【0026】

1995年8月17日に公表された国際公開公報第95/21843号には、アザサイクリック縮合ピペラジンによって置換した特定のベンゾチアゼピンが記載されている。これらの化合物は、鎮痛剤および利尿剤として、そして脳虚血治療のために有用なカップ受容体アゴニストとして同定されている。

## 【0027】

1989年10月25日に公表された欧州特許第338331号には、筋弛緩剤として有用な特定の2-ベンゾチアゼピン-5-オンが記載されている。

## 【0028】

発明の概要

本発明の第一の局面は、高脂血症疾患、病態、および／または障害の予防および／または治療にとって有効な薬剤である新規1,2-ベンゾチアゼピンを含む。

## 【0029】

本発明の第二の局面は、高脂血症疾患、病態、および／または障害の予防および／または治療に適した新規1,2-ベンゾチアゼピンを含む薬学的組成物を含む。

## 【0030】



本発明の第三の局面は、新規1,2-ベンゾチアゼピンの一つの予防的または治療的有効量を被験者に投与することを含む、高脂血症疾患、病態、および／または障害の予防および／または治療のための方法を含む。

### 【0031】

本発明の第四の局面は、本発明の新規1,2-ベンゾチアゼピンを作製する方法を含む。

### 【0032】

本発明のさらなる局面は、本出願の明細書をにより考察される。

### 【0033】

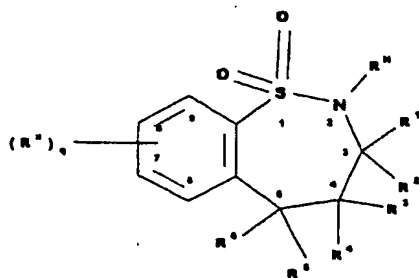
#### 発明の詳細な説明

以下の詳細な説明は、本発明の実施において当業者を助けるために提供される。本発明の発見の意図または範囲から逸脱することなしに、本明細書記載の態様における改変および変更が当業者により行われうるが、しかし、この詳細な説明が本発明を不当に制限すると解釈されるべきではない。これらの主な参照において引用された参照の内容を含む、本明細書に引用した個々の参照の内容は、その全文が参照として本明細書に組み入れられる。

### 【0034】

したがって、本発明は式 (I) の構造に相当する化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを提供する：

#### 【化11】



(I)

式中、

qは1～4までの整数である；

R<sup>1</sup> およびR<sup>2</sup> は、水素およびヒドロカルビルからなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基によって置換してもよく、そして上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい、；

R<sup>3</sup> およびR<sup>4</sup> は、水素；ヒドロカルビル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> からなる群より独立して選択される；または

R<sup>3</sup> およびR<sup>4</sup> は共に、=O；=NOR<sup>9</sup>；=S；=NNR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；=NR<sup>9</sup>；または=CR<sup>11</sup>R<sup>12</sup>を形成する；

式中、R<sup>9</sup> およびR<sup>10</sup> は、水素；ヒドロカルビル；アミノ；およびヒドロカルビルアミノからなる群より独立して選択され；上記ヒドロカルビル部分は選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基によって置換してもよく；および上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>11</sup> およびR<sup>12</sup> は、水素；-CN；ハロゲン；オキソ；ヒドロカルビル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> からなる群より独立して選択され；上記ヒドロカルビルは選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基によって置換してもよく；および上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

R<sup>11</sup> およびR<sup>12</sup> は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；な r ばいに

R<sup>5</sup> およびR<sup>6</sup> は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；第四ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup> からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-\text{NO}_2$ ； $-\text{CN}$ ；オキソ；ヒドロカルビル； $-\text{OR}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{SR}^{13}$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_3\text{R}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{O}\text{R}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{CO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$ ； $-\text{COR}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{C}(\text{O})\text{R}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{C}(\text{O})\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{CO}_2\text{R}^{14}$ ； $-\text{OC}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{OC}(\text{O})\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{SOR}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{SO}_2\text{R}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{SONR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{SO}_2\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{P}\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ； $-\text{P}(\text{OR}^{13})\text{OR}^{14}$ ； $-\text{S}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ；および  $-\text{N}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$  からなる群より独立して選択され；式中上記ヒドロカルビルは選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基によって置換してもよく；および上記ヒドロカルビル部分は選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、および  $\text{R}^{15}$  は、水素およびヒドロカルビルからなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を含む一つもしくはそれ以上の基によって置換してもよく、および上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；または

式中、 $\text{R}^{13}$  および  $\text{R}^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $\text{R}^{14}$  および  $\text{R}^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、 $\text{A}^-$  は、薬学的に許容される陰イオンであり、 $\text{M}$  は薬学的に許容される陽イオンである；および

式中  $\text{R}^0$  は先に定義したとおりであり；または

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^6$  は共に結合を表し；ならびに

$\text{R}^0$  は、水素およびヒドロカルビルからなる群より選択され、上記ヒドロカルビルは選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基

によって置換してもよく、および上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；

一つまたはそれ以上のRXラジカルは、選択的に水素；ハロゲン； $-\text{CN}$ ； $-\text{NO}_2$ ；ヒドロカルビル； $-\text{OR}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{SR}^{13}$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_3\text{R}^{13}$ ； $-\text{S}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ； $-\text{NR}^{13}\text{OR}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{CO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{NR}^{14}\text{C}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$ ； $-\text{COR}^{13}$ ； $-\text{S}(\text{O})_n\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{N}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ； $-\text{PR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択され、上記ヒドロカルビルは、選択的に、一つまたはそれ以上のヘテロ原子を含む一つまたはそれ以上の基によって置換してもよく、および上記ヒドロカルビルは選択的に、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のヘテロ原子によって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；ならびに

式中、 $n$ は0、1または2である；ならびに

式中、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、 $\text{R}^{15}$ 、 $\text{A}^-$ および $\text{M}$ は上記の通りである；または

但し、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、および $\text{R}^6$ の少なくとも一つが水素またはアルキル以外のラジカルである；ならびに

但し、 $\text{R}^5$ または $\text{R}^6$ がアリールである場合、 $\text{R}^5$ および $\text{R}^6$ のもう一方の基はヘテロシクロアルキル以外のラジカルである。

### 【0035】

好ましいクラスの化合物は、以下のような式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む：

$q$ は1～4の整数である；

$\text{R}^1$ および $\text{R}^2$ は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアルキニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテ

ロシクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリー  
ルからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルまたは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルケニルを形成する；

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニ  
ル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリ  
ルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニ  
ル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアル  
キニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロ  
シクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリー  
ルラジカルは、選択的に、 $-\text{CN}$ ；ハロゲン；オキソ； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w$   
 $\text{A}^-$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9 \text{R}^{10}$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{R}^w \text{A}^-$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2 \text{R}^9$ ； $-\text{SO}_3 \text{R}^9$ ； $-\text{C}$   
 $\text{O}_2 \text{R}^9$ ；および  $-\text{CONR}^9 \text{R}^{10}$  からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカ  
ルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；シクロアルケニ  
ル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリ  
ルアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニ  
ル；アリールオキシアルキル；アリールオキシアルケニル；アリールオキシアル  
キニル；ヘテロシクリルオキシアルキル；ヘテロシクロキシアルケニル；ヘテロ  
シクリルオキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリー  
ルラジカルは、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^9-$ ； $-\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+ \text{R}^9$   
 $\text{A}^-$ ； $-\text{PR}^9-$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^9-$ ； $-\text{P}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10} \text{A}^-$ ；またはフェニレンによって置換された一  
つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

$\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、および  $\text{R}^w$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アル  
キニル；アリール；ヘテロシクリル；アルキルアンモニウムアルキル；アリール  
アルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル  
；カルボアルコキシアルキル；カルボキシアリール；カルボキシヘテロシクリル  
；アミノ；アルキルアミノ；カルボキシアルキルアミノ；アルコキシアルキルア  
ミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される、または

式中A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>は共に、=O；=NOR<sup>9</sup>；=S；=NNR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；=NR<sup>9</sup>；または=CR<sup>11</sup>R<sup>12</sup>を形成する；

式中、R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、水素；-CN；ハロゲン；オキソ；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；アルコキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；シクロアルキル；シクロアルケニル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シアノアルキル；-OR<sup>9</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SR<sup>9</sup>；S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群より独立して選択される；または

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、上記の通りである；および

R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>9</sup>；-SR<sup>9</sup>；S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；および-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>からなる群より独立して選択される；

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>の、アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のラジカルに

よって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル； $-OR^7$ ； $-NR^7R^8$ ； $-SR^7$ ； $-S(O)R^7$ ； $-SO_2R^7$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^7$ ； $-CONR^7R^8$ ； $-N^+R^7R^8R^9A^-$ ； $-P(O)R^7R^8$ ； $-PR^7R^8$ ； $-P^+R^7R^8R^9A^-$ ；および  $-P(O)(OR^7)OR^8$  からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  ラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-NR^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素原子を有してもよい；および

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の、アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$  および  $R^{17}$  は、 $R^9$  および  $M$  からなる群より独立して選択される；ならびに

$M$  は薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および  $A^-$  は上記の通りである；ならびに

$R^N$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アラールキル；およびヘテロシクリルアルキルからなる群より選択される；および

一つまたはそれ以上の  $R^x$  ラジカルは、水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}R^{18}$ ； $NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^x$  のアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール



アルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；オキソ；-OR<sup>16</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>16</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-PO(OR<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>；-P<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>11</sup>R<sup>12</sup>A<sup>-</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>x</sup>の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR)<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；および炭化水素残基からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、炭素を含むR<sup>x</sup>ラジカルは、選択的に、-O-；-NR<sup>13</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>13</sup>-；-P(O)R<sup>13</sup>-；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>-；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよく、上記フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；およびポリアルキルは、選択的に、-O-；-NR<sup>9</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>9</sup>-；PR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>-または-P(O)R<sup>9</sup>-によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>18</sup>は、アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される；ならびに

式中、R<sup>18</sup>のアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールオキシカルボニル；およびヘテロシクリルアル

コキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；NO<sub>2</sub>；オキソ；-OR<sup>9</sup>；  
-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>11</sup>R<sup>12</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>9</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；  
-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-PR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-PO(OR<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>；および-C(O)OM  
Mからなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換しても  
よい；ならびに

式中、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>、R<sup>w</sup>、A<sup>-</sup>、およびMは上記の通りである。

### 【0036】

本発明の様々な態様において、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>は好ましくは、H；アリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>のアリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>のラジカルアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つま

たはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^5$  および  $R^6$  のラジカルは、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^7-$ ； $-N^+R^7R^8A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^7A^-$ ； $-PR^7-$ ； $-P(O)R^7-$ ； $-P^+R^7R^8A^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$  および  $R^{15}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；ハロア

ルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリー  
ール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カ  
ルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$   
； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(O$   
 $R^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる  
群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；なら  
びに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポ  
リアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロ  
シクリル；アリーールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルア  
ルキル；アルキルアリーールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキ  
ルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニ  
ルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテ  
ルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9$   
 $A^--$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^--$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残  
基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つまたはそれ  
以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；なら  
びに

式中、 $M$ は薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は、式Iの化合物に関して先に述べた  
通りである。

### 【0037】

より好ましくは、 $R^5$ または $R^6$ は、式 $-Ar-(R_y)_t$ を有する：

式中、

$t$ は0～5までの整数である；

$Ar$ は、フェニル；チオフェニル；ピリジル；ピペラジニル；ピペロニル；ピロ  
リル；ナフチル；フラニル；アントラセニル；キノリニル；イソキノリニル；キ  
ノキサリニル；イミダゾリル；ピラゾリル；オキサゾリル；イソキサゾリル；ピ

リミジニル；チアゾリル；トリアゾリル；イソチアゾリル；インドリル；ベンゾイミダゾリル；ベンズオキサゾリル；ベンゾチアゾリル；およびベンゾイソチアゾリルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上のR<sub>v</sub>は、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、R<sub>v</sub>ラジカルはアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキルおよびポリエーテル置換体は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sub>v</sub>ラジカルはアルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、R<sup>7</sup>およびR<sup>8</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；

およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式または多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアリル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアリル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロ

シクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A--$ ； $-PR^9-$ ； $PR^9R^{10}A--$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；および

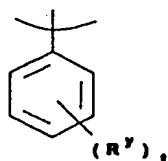
式中、 $M$ は、薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A-$ は、式Iの化合物に関して先に述べた通りである。

#### 【0038】

さらにより好ましくは、 $R^5$ または $R^6$ の少なくとも一つは式(II)を有する：

#### 【化12】



(II)

式中、 $R^v$ および $t$ は上記の通りである。

#### 【0039】

本発明の様々な態様において、式Iの化合物は好ましくは、以下のさらなる条件の少なくとも一つまたはそれ以上を満たす：

(1)  $R^1$ および $R^2$ は、水素、アルキル、および $(C_3-10)$ シクロアルキルからなる群より独立して選択される。好ましくは、 $R^1$ および $R^2$ は、水素および $(C_1-10)$ アルキルからなる群より独立して選択される。より好ましくは、 $R^1$ および $R^2$ は、 $C_1-10$ アルキルからなる群より独立して選択される。さらにより好ましくは

、 $R^1$  および  $R^2$  は、 $(C_1-7)$  アルキルからなる群より独立して選択される。さらにより好ましくは、 $R^1$  および  $R^2$  は、 $(C_2-4)$  アルキルからなる群より独立して選択される。さらにより好ましくは、 $R^1$  および  $R^2$  は、同じ  $(C_2-4)$  アルキルである。さらにより好ましくは、 $R^1$  および  $R^2$  はそれぞれ、 $n$ -ブチルである；および／または

(2)  $R^3$  および  $R^4$  は、 $R^9$  が式Iの化合物に関して先に述べたように定義される、水素および  $-OR^9$  からなる群より独立して選択される。好ましくは、 $R^3$  は水素であって、 $R^4$  は  $OR^9$  である。さらにより好ましくは、 $R^3$  は水素であって、 $R^4$  はヒドロキシである。さらにより好ましくは、ヒドロキシ基は、式IIの構造と  $syn$  関係にある；および／または

(3)  $R^5$  は、 $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)R^{14}$ ； $-NR^{13}C(O)NR^{14}R^{15}$ ； $-NR^{13}CO_2R^{14}$ ； $-OC(O)R^{13}$ ； $-OC(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}SOR^{14}$ ； $-NR^{13}SO_2R^{14}$ ； $-NR^{13}SONR^{14}R^{15}$ ；および  $-NR^{13}SO_2NR^{14}R^{15}$  からなる群より選択されるラジカルによってフェニル置換されており、式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は式Iの化合物に関して先に記載した通りである。さらにより好ましくは、 $R^5$  は、 $-OR^{13}$  または  $-NR^{13}C(O)R^{14}$  によってフェニル置換されている。さらにより好ましくは、 $R^5$  は、 $R^{13}$  が四級ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリルアルキル、もしくはアルキルアンモニウムアルキルを含む  $-OR^{13}$  のパラもしくはメタ位でフェニル置換されている、または  $R^5$  が、 $R^{13}$  が水素であって、 $R^{14}$  が四級ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリルアルキル、もしくはアルキルアンモニウムアルキルを含む  $-NR^{13}C(O)R^{14}$  のパラまたはメタ位でフェニル置換されている；および／または

(4)  $R^6$  は水素である；および／または

(5)  $R^N$  は水素、アルキルおよびアラルキルからなる群より選択される。好ましくは、 $R^N$  は水素、 $(C_1-10)$  アルキル、およびアリール  $(C_1-10)$  アルキルからなる群より選択される。より好ましくは、 $R^N$  は水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される。さらにより好ましくは、 $R^N$  は水素である；および／または

(6)  $R^x$  は、 $-OR^{13}$ 、 $-NR^{13}R^{14}$ 、 $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ 、およびポリエーテルからなる群より独立して選択される。より好ましくは、 $R^x$  は、 $-OR^{13}$  および  $-NR^{13}R^{14}$  から



なる群より選択される。さらにより好ましくは、 $R^x$ は、アルコキシ、アミノ、アルキルアミノ、およびジアルキルアミノからなる群より選択される。さらにより好ましくは、 $R^x$ は、メトキシおよびジメチルアミノからなる群より選択される；および／または

(7) 一つまたはそれ以上の $R^x$ は、式Iの構造のベンゾ環の7-、8-、または9-位に存在する。好ましくは、上記 $R^x$ は、式Iの構造のベンゾ環の7-および9-位に存在する。より好ましくは、上記 $R^x$ は、式Iの構造のベンゾ環の7-位に存在する。

(8)  $q$ は1、2、または3である。好ましくは、 $q$ は1、または2であり、より好ましくは $q$ は1である；および／または

(9)  $t$ は1または2である。

#### 【0040】

本発明のさらにもう一つの態様において、式Iの化合物は、上記条件の少なくとも一つまたはそれ以上を満たし、 $R^5$ は炭化水素残基を含む。

#### 【0041】

より好ましいクラスの化合物は、以下のような、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む：

$q$ は1～4までの整数である；

$R^1$  および  $R^2$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリールアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $C_3-C_{10}$ シクロアルキルまたは $C_3-C_{10}$ シクロアルケニルを形成する；および

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリールアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^9$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換しても

よい；ならびに

式中、 $R^1$  および  $R^2$  のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーールアルキル；アルコキシアルキル；アルコキシアルケニル；アルコキシアルキニル；アルキルアリーール；および（ポリアルキル）アリーールラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P(O)R^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ；またはフェニレンによって置換される一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；および

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および  $R^w$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；アルキルアンモニウムアルキル；アリーールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；カルボキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシアルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $A^-$  は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$R^3$  および  $R^4$  は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および  $-SO_3R^9$  からなる群より独立して選択される；または

$R^3$  および  $R^4$  は共に、 $=O$ ； $=NOR^9$ ； $=S$ ； $=NNR^9R^{10}$ ； $=NR^9$ ；または  $=CR^{11}R^{12}$  を形成する；

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素； $-CN$ ；ハロゲン；オキソ；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；アリーールアルキル；カルボキシアルキル；カルボアルコキシアルキル；シクロアルキル；シアノアルキル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ；および  $-CONR^9R^{10}$  からなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子に共に結合して、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^9$  および  $R^{10}$  は上記の定義の通りである；ならびに

$R^5$  および  $R^6$  は、水素；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリーール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-SR^9$ ； $S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および  $-SO_3R^9$  からなる群より独立して選択される；

R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> のアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；および四級ヘテロシクリルラジカルは、選択的にハロゲン；-CN；NO<sub>2</sub>；オキソ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> ラジカルは、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキルおよびポリエーテル置換基は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> ラジカルは、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；NR<sup>7</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> は、水素およびアルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、選択的にオキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアリルアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ；アルキル；スルホアルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアリル；グアニジニル；-OR<sup>16</sup>；-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>w</sup>A<sup>-</sup>；-SR<sup>16</sup>；-S(O)R<sup>9</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>16</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>16</sup>；-CONR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-SO<sub>2</sub>NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-PO(O R<sup>16</sup>)OR<sup>17</sup>；-PR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>R<sup>11</sup>A<sup>-</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>9</sup>R<sup>10</sup>A<sup>-</sup>；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキ

ルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^{--}$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $M$ は、薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は、式Iの化合物に関して先に述べた通りである；ならびに

$R^N$ は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；およびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}R^{18}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

$R^x$ のアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；アシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^{10}$ ； $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^x$ の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン； $-\text{CN}$ ； $-\text{NO}_2$ ；オキソ；アルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル； $-\text{OR}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{SR}^{13}$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_3\text{R}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{OR}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{CO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$ ； $-\text{COR}^{13}$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{PR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ； $-\text{P}(\text{OR})^{13}\text{OR}^{14}$ ； $-\text{S}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ； $-\text{N}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、炭素を含む $R^x$ ラジカルは、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^{13}-$ ； $-\text{N}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+\text{R}^{13}\text{A}^-$ ； $-\text{PR}^{13}-$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{13}-$ ； $-\text{PR}^{13}-$ ； $-\text{P}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ；フェニレン；アミノ酸；ペプチド；ポリペプチド；炭化水素；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよく、上記フェニレン；アミノ酸；ペプチド；ポリペプチド；炭化水素；およびポリアルキルは、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^9-$ ； $-\text{N}^+\text{R}^9\text{R}^{10}\text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+\text{R}^9\text{A}^-$ ； $-\text{P}^-\text{R}^9-$ ； $\text{P}^+\text{R}^9\text{R}^{10}\text{A}^-$ または $-\text{P}(\text{O})\text{R}^9-$ によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $\text{R}^{18}$ は、アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルからなる群より選択される；ならびに

式中、 $\text{R}^{18}$ のアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；アシル；アルコキシカルボニル；アリールアルコキシカルボニル；およびヘテロシクリルアルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-\text{CN}$ ；オキソ； $-\text{OR}^9$ ； $-\text{NR}^9\text{R}^{10}$ ； $-\text{N}^+\text{R}^9\text{R}^{11}\text{R}^{12}\text{A}^-$ ； $-\text{SR}^9$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^9$ ； $-\text{SO}_2\text{R}^9$ ； $-\text{SO}_3\text{R}^9$ ； $-\text{CO}_2\text{R}^9$ ； $-\text{CONR}^9\text{R}^{10}$ ； $-\text{SO}_2\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{NR}^9\text{R}^{10}$ ； $-\text{PR}^9\text{R}^{10}$ ； $-\text{P}(\text{OR}^{13})\text{OR}^{14}$ ； $-\text{PO}(\text{OR}^{16})\text{OR}^{17}$ ；および $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$ からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および $M$ は上記の通りである。

# 【0042】

重要な種類の化合物は、以下のような、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む：

$q$ は1～4までの整数である；

$R^1$  および  $R^2$  は、水素； $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルキニル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、 $(C_3-C_{10})$  シクロアルキルを形成する；ならびに

式中、 $R^1$  および  $R^2$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルキニル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-CN$ ；ハロゲン；オキソ； $-OR^9$ ； $-NR^9 R^{10}$ ； $-N^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ； $-SR^9$ ； $-S^+ R^9 R^{10} A^-$ ； $-PR^9 R^{10}$ ； $-P^+ R^9 R^{10} R^w A^-$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2 R^9$ ； $-SO_3 R^9$ ； $-CO_2 R^9$ ；および $-CONR^9 R^{10}$ からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^1$  および  $R^2$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_1-C_{10})$  アルコキシ  $(C_2-C_{10})$  アルキニル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール；および（ポリアルキル）アリールラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+ R^9 R^{10} A^{--}$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+ R^9 A^{--}$ ； $-PR^9-$ ； $-P(O)R^9-$ ； $P^+ R^9 R^{10} A^{--}$ ；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；なら

びに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および $R^w$ は、水素；( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキル；( $C_2-C_{10}$ )アルケニル；( $C_2-C_{10}$ )アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アンモニウム( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_1-C_{10}$ )アルキルアンモニウム( $C_1-C_{10}$ )アルキル；アリール( $C_1-C_{10}$ )アルキル；ヘテロシクリル( $C_1-C_{10}$ )アルキル；カルボキシ( $C_1-C_{10}$ )アルキル；カルボ( $C_1-C_{10}$ )アルコキシ( $C_1-C_{10}$ )アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ( $C_1-C_{10}$ )アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $A^-$ は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

$R^3$ および $R^4$ は、水素；( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_2-C_{10}$ )アルケニル；( $C_2-C_{10}$ )アルキニル；アリール；ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される；または

$R^3$ および $R^4$ は共に、 $=O$ ； $=NOR^9$ ； $=S$ ； $=NNR^9R^{10}$ ； $=NR^9$ ；または $=CR^{11}R^{12}$ を形成する；

式中、 $R^{11}$ および $R^{12}$ は、水素； $-CN$ ；ハロゲン；オキソ；( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_2-C_{10}$ )アルケニル；( $C_2-C_{10}$ )アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール( $C_1-C_{10}$ )アルキル；カルボキシ( $C_1-C_{10}$ )アルキル；カルボ( $C_1-C_{10}$ )アルコキシ( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキル；シアノ( $C_1-C_{10}$ )アルキル； $-OR^9$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-SR^9$ ； $S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^9$ ； $-CO_2R^9$ ；および $-CONR^9R^{10}$ からなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$ および $R^{12}$ は、それらが結合する炭素原子と共に環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^9$ および $R^{10}$ は上記の通りである；ならびに

$R^5$ および $R^6$ は、水素；( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキル；( $C_2-C_{10}$ )アルケニル；( $C_2-C_{10}$ )アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル； $-OR^9$ ； $-SR^9$ ； $S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ；および $-SO_3R^9$ からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^5$ および $R^6$ の( $C_1-C_{10}$ )アルキル；( $C_3-C_{10}$ )シクロアルキル；( $C_2-C_{10}$ )アルケニル；( $C_2-C_{10}$ )アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテ



ロシクリルラジカルは、選択的に、ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキソ；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；ポリアルキル；ハロ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)シクロアルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；ヘテロシクリル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>ラジカル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ポリアルキル、ハロ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ヒドロキシ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)シクロアルキル、(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルケニル、(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリール(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ヘテロシクリル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキソ；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)シクロアルキル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルケニル；(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；ヘテロシクリル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>ラジカル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ポリアルキル、ハロ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ヒドロキシ(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)シクロアルキル、(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルケニル、(C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリール(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、ヘテロシクリル(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)アルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^7$  および  $R^8$  は、水素および  $(C_1-C_{10})$  アルキルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素； $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ハロ  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_3-C_{10})$  シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$  アルケニル； $(C_2-C_{10})$  アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアリール  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアンモニウム  $(C_1-C_{10})$  アルキル；アミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル； $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキルアミノカルボニル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；スルホ；オキソ； $(C_1-C_{10})$  アルキル；スルホ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル  $(C_1-C_{10})$  アルキル；カルボキシ；カルボキシ  $(C_1-C_{10})$  アルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9 R^{10}$ ； $-N^+ R^9 R^{10} R^{11} A^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2 R^9$ ； $-SO_3 R^{16}$ ； $-CO_2 R^{16}$ ； $-CONR^9 R^{10}$ ； $-SO_2 NR^9 R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9 R^{10}$ ； $-P^+ R^9 R^{10} R^{11} A^-$ ；および炭

化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；および

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ の $(C_1-C_{10})$ アルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_3-C_{10})$ シクロアルキル；ポリアルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；四級ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアリール $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアンモニウム $(C_1-C_{10})$ アルキル；アミノカルボニル $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_1-C_{10})$ アルキルアミノカルボニル $(C_1-C_{10})$ アルキル；カルボキシ $(C_1-C_{10})$ アルキルアミノカルボニル $(C_1-C_{10})$ アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^-$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

$M$ は薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は上記の通りである；ならびに

$R^N$ は、水素； $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；およびアリール $(C_1-C_{10})$ アルキルからなる群より選択される；ならびに一つまたはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、水素；ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ； $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_3-C_{10})$ シクロアルキル；ポリアルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル；アシルオキシ； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-S(O)_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{14}C(O)R^{13}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $COR^{13}$ ； $-OR^{18}$ ； $-S(O)_nNR^{13}R^{14}$ ； $-NR^{13}R^{18}$ ； $-NR^{18}OR^{14}$ ； $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ；アミノ酸残基

；ペプチド残基；ポリペプチド残基；および炭化水素残基からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^x$ の $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_3-C_{10})$ シクロアルキル；ポリアルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヒドロキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル；アシルオキシラジカルは、選択的に、ハロゲン； $-CN$ ；オキソ； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-P^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{11}R^{12}A^-$ ；または $-S^+R^9R^{10}A^-$ によってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^x$ の四級ヘテロシクリルラジカルは選択的に、ハロゲン； $-CN$ ； $-NO_2$ ；オキソ； $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_3-C_{10})$ シクロアルキル；ポリアルキル；ハロ $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヒドロキシ $(C_1-C_{10})$ アルキル； $(C_2-C_{10})$ アルケニル； $(C_2-C_{10})$ アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリール $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル $(C_1-C_{10})$ アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ； $-SR^{13}$ ； $-S(O)R^{13}$ ； $-SO_2R^{13}$ ； $-SO_3R^{13}$ ； $-NR^{13}OR^{14}$ ； $-NR^{13}NR^{14}R^{15}$ ； $-CO_2R^{13}$ ； $-OM$ ； $-SO_2OM$ ； $-SO_2NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)NR^{13}R^{14}$ ； $-C(O)OM$ ； $-COR^{13}$ ； $-P(O)R^{13}R^{14}$ ； $-PR^{13}R^{14}$ ； $-P^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ ； $-P(OR^{13})OR^{14}$ ； $-S^+R^{13}R^{14}A^-$ ；および $-N^+R^{13}R^{14}R^{15}A^-$ からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、炭素を含む $R^x$ ラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^{13}-$ ； $-N^+R^{13}R^{14}A^--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^{13}A^--$ ； $-PR^{13}-$ ； $-P(O)R^{13}-$ ； $-PR^{13}R^{14}-$ ； $-P^+R^{13}R^{14}A^--$ ；フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；ポリエーテル；またはポリアルキルによって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよく、上記フェニレン；アミノ酸残基；ペプチド残基；ポリペプチド残基；炭化水素残基；およびポリアルキルは、選択的に、 $-O-$ ； $NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^--$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^--$ ； $-PR^9-$ ； $PR^9R^{10}A^--$ または $-P(O)R^9-$ によって置換された一つまたはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{18}$ は、 $(C_1-C_{10})$ アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；

アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル ; アシル ; およびアリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシカルボニルからなる群より選択される ; ならびに

式中、 $R^{18}$  の ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル ; ヘテロシクリル ; 四級ヘテロシクリル ; アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル ; アシル ; およびアリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルコキシカルボニルラジカルは、選択的に、ハロゲン ;  $-CN$  ; オキソ ;  $-OR^9$  ;  $-NR^9 R^{10}$  ;  $-N^+ R^9 R^{11} R^{12} A^-$  ;  $-SR^9$  ;  $-S(O) R^9$  ;  $-SO_2 R^9$  ;  $-SO_3 R^9$  ;  $-CO_2 R^9$  ;  $-CONR^9 R^{10}$  ;  $-SO_2 OM$  ;  $-SO_2 N R^9 R^{10}$  ;  $-PR^9 R^{10}$  ;  $-P(OR^{13}) OR^{14}$  ;  $-PO(OR^{16}) OR^{17}$  ; および  $-C(O) OM$  からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい ; ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^w$ 、 $A^-$ 、および  $M$  は上記の通りである ;

但し、アリールは、選択的に置換されたフェニル、ビフェニル、およびナフチルからなる群より選択される ; および

但し、ヘテロシクリルは、5~10員環を含み、ならびに酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より選択されるヘテロ原子である一つまたはそれ以上の環原子を含む、選択的に置換したヘテロシクリルからなる群より選択される。

### 【0043】

特に重要な種類の化合物は、以下のような、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む :

$q$  は 1 ~ 4 までの整数である ;

$R^1$  および  $R^2$  は、水素、メチル、エチル、 $n$ -プロピル、イソプロピル、 $n$ -ブチル、イソブチル、 $sec$ -ブチル、 $tert$ -ブチル、ペンチル、ヘキシル、フェノキシメチレン、フェノキシエチレン、フェノキシプロピレン、ピリジニルオキシメチレン、ピリジニルオキシエチレン、メチルピリジニルオキシメチレン、メチルピリジニルオキシエチレン、ピリミジニルオキシメチレン、およびピリミジニルオキシエチレンからなる群より独立して選択される ; または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、またはシクロヘキシルを形成する ; ならびに

$R^3$  および  $R^4$  は、水素、ヒドロキシ、メチル、エチル、フェニル、ピリジニル、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、およびジエチルアミノ

からなる群より独立して選択される；ならびに

R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> は、水素、フェニル、クロロフェニル、フルオロフェニル、ブロモフェニル、ヨードフェニル、ヒドロキシフェニル、メトキシフェニル、エトキシフェニル、メトキシ（クロロフェニル）、メトキシ（フルオロフェニル）、メトキシ（ブロモフェニル）、メトキシ（ヨードフェニル）、エトキシ（クロロフェニル）、エトキシ（フルオロフェニル）、エトキシ（ブロモフェニル）、エトキシ（ヨードフェニル）、ニトロフェニル、アミノフェニル、メチルアミノフェニル、ジメチルアミノフェニル、エチルアミノフェニル、ジエチルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムフェニル、トリエチルアンモニウムフェニル、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、メチルカルボニルアミノフェニル、クロロメチルカルボニルアミノフェニル、フルオロメチルカルボニルアミノフェニル、ブロモメチルカルボニルアミノフェニル、ヨードメチルカルボニルアミノフェニル、エチルカルボニルアミノフェニル、クロロエチルカルボニルアミノフェニル、フルオロエチルカルボニルアミノフェニル、ブロモエチルカルボニルアミノフェニル、ヨードエチルカルボニルアミノフェニル、プロピルカルボニルアミノフェニル、クロロプロピルカルボニルアミノフェニル、フルオロプロピルカルボニルアミノフェニル、ブロモプロピルカルボニルアミノフェニル、ヨードプロピルカルボニルアミノフェニル、ブチルカルボニルアミノフェニル、クロロブチルカルボニルアミノフェニル、フルオロブチルカルボニルアミノフェニル、ブロモブチルカルボニルアミノフェニル、ヨードブチルカルボニルアミノフェニル、3,4-ジオキシメチレンフェニル、ピリジニル、メチルピリジニル、ピリジニウム、メチルピリジニウム、チエニル、クロロチエニル、フルオロチエニル、ブロモチエニル、ヨードチエニル、メトキシカルボニルフェニル、エトキシカルボニルフェニル、トリメチルアンモニウムエトキシ

エトキシエトキシフェニル、トリエチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシフェニル、クロロエトキシエトキシエトキシフェニル、フルオロエトキシエトキシエトキシフェニル、ブロモエトキシエトキシエトキシフェニル、ヨードエトキシエトキシエトキシフェニル、ピリジニウムエトキシエトキシエトキシフェニル、ピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、メチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、ジメチルピペラジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、ピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、メチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニル、およびジメチルピペリジニルオキシメトキシエトキシエトキシフェニルからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^N$  は、水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、*n*-ブチル、*n*-ペンチル、*n*-ヘキシル、およびベンジルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上の $R^x$  ラジカルは、ヒドロキシ、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、エチルチオ、エチルスルフィニル、エチルスルホニル、アミノ、ヒドロキシアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、*N*-メチル-*N*-カルボキシメチル-アミノ、*N,N*-ジメチル-*N*-カルボキシメチル-アンモニウム、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、*n*-プロピルカルボニルアミノ、*n*-ブチルカルボニルアミノ、*n*-ペンチルカルボニルアミノ、*n*-ヘキシルカルボニルアミノ、ベンジルオキシカルボニルアミノ、アミノイミドカルボニルアミノ、モルホリニル、*N*-メチル-モルホリニウム、アゼチジニル、*N*-メチル-アゼチジニウム、ピロリジン、*N*-メチル-ピロリジニウム、ピペラジニル、*N*-メチルピペラジニル、*N,N'*-ジメチル-ピペラジニウム、ピペリジニル、メチルピペリジニル、*N*-メチル-ピペリジニウム、およびチエニルからなる群より独立して選択される。

【0044】

特に重要な種類の化合物は、以下のような、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む：

$q$ は1～4までの整数である；

$R^1$  および  $R^2$  は、水素および ( $C_1-C_{10}$ ) アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^1$  および  $R^2$  は、それらが結合する炭素と共に、( $C_3-C_{10}$ ) アルキルを形成する；ならびに

$R^3$  および  $R^4$  は、水素およびヒドロキシからなる群より独立して選択される；ならびに

$R^5$  はフェニルであり、フェニルは選択的に、ハロゲン；ヒドロキシ； $-NO_2$ ；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ハロ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ポリエーテル； $-OR^{13}$ ； $-NR^{13}R^{14}$ ；および  $-NR^{13}C(O)R^{14}$ ；からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  は、水素；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ハロ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；四級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および  $R^{15}$  の ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ハロ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；4級ヘテロシクリル；アリール ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；4級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；( $C_1-C_{10}$ ) アルキルアンモニウム ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、ハロゲン；( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル；カルボキシ；カルボキシ ( $C_1-C_{10}$ ) アルキル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^{10}A^-$ ；および  $-CONR^9R^{10}$  からなる群より選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに



式中、 $R^0$  および  $R^{10}$  は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヘテロシクリル；アンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアンモニウム (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヘテロシクリル (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシヘテロシクリル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルアミノ；およびアシルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $A^-$  は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

式中、 $R^{11}$  および  $R^{12}$  は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ヘテロシクリル；アリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；カルボキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；およびカルボ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルコキシ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より独立して選択される；または

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は、それらが結合する炭素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^w$  および  $R^{16}$  は、式Iの化合物に関して先に述べたとおりである；ならびに

$R^6$  は、水素である；ならびに

$R^N$  は、水素；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；およびアリール (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上の  $R^x$  ラジカルは、水素；-NO<sub>2</sub>；(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；ハロ (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>) アルキル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup> からなる群より独立して選択される；

式中、 $R^{13}$  および  $R^{14}$  は、上記の通りである；ならびに

但し、アリールは、選択的に置換されたフェニル、ビフェニル、およびナフチルからなる群より選択される；ならびに

但し、ヘテロシクリルは、5～10員環を含み、酸素、窒素、硫黄、および燐からなる群より選択されるヘテロ原子である一つまたはそれ以上の原子を含む、選択的に置換されたヘテロシクリルからなる群より選択される。

#### 【0045】

特に重要な種類の化合物は、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはプロドラッグを含む：

$q$  は 1～4 までの整数である；

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、エチルおよび n-ブチルからなる群より独立して選択される；または

R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、それらが結合する炭素と共に、シクロペンチルを形成する；および

R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> の一つは水素であり、R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> のもう一つはヒドロキシである；ならびに

R<sup>5</sup> は、フェニル、ヒドロキシフェニル、メトキシフェニル、エトキシフェニル、ニトロフェニル、アミノフェニル、メチルアミノフェニル、ジメチルアミノフェニル、エチルアミノフェニル、ジエチルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムフェニル、トリエチルアンモニウムフェニル、トリメチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムメチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムエチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムプロピルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、トリエチルアンモニウムブチルカルボニルアミノフェニル、メチルカルボニルアミノフェニル、クロロメチルカルボニルアミノフェニル、フルオロメチルカルボニルアミノフェニル、ブロモメチルカルボニルアミノフェニル、ヨードメチルカルボニルアミノフェニル、エチルカルボニルアミノフェニル、クロロエチルカルボニルアミノフェニル、フルオロエチルカルボニルアミノフェニル、ブロモエチルカルボニルアミノフェニル、ヨードエチルカルボニルアミノフェニル、プロピルカルボニルアミノフェニル、クロロプロピルカルボニルアミノフェニル、フルオロプロピルカルボニルアミノフェニル、ブロモプロピルカルボニルアミノフェニル、ヨードプロピルカルボニルアミノフェニル、ブチルカルボニルアミノフェニル、クロロブチルカルボニルアミノフェニル、フルオロブチルカルボニルアミノフェニル、ブロモブチルカルボニルアミノフェニル、ヨードブチルカルボニルアミノフェニル、トリメチルアンモニウムエトキシエトキシエトキシフェニル、トリエチルアンモニウムメトキシエトキシエトキシフェニル、クロロエトキシエトキシエトキシフェニル、フルオロエトキシエトキシエトキシフェニル、ブロモエト

キシエトキシエトキシフェニル、ヨードエトキシエトキシエトキシフェニル；およびピリジニウムエトキシエトキシエトキシフェニルからなる群より選択される；ならびに

$R^6$  は水素である；

$R^N$  は、水素、メチル、エチル、およびベンジルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上の $R^x$  ラジカルは、ヒドロキシ、メチル、エチル、メトキシ、エトキシ、アミノ、ヒドロキシアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、エチルアミノ、ジエチルアミノ、トリメチルアンモニウム、トリエチルアンモニウム、 $N$ -メチル- $N$ -カルボキシメチル-アミノ、 $N,N$ -ジメチル- $N$ -カルボキシメチル-アンモニウム、メチルカルボニルアミノ、クロロメチルカルボニルアミノ、フルオロメチルカルボニルアミノ、ブロモメチルカルボニルアミノ、ヨードメチルカルボニルアミノ、エチルカルボニルアミノ、ベンジルオキシカルボニルアミノ、およびアミノイミドカルボニルアミノ、からなる群より独立して選択される。

#### 【0046】

非常に重要な化合物のサブクラスは、以下のような、式Iの化合物、またはその薬学的に許容される塩、溶媒和化合物、もしくはそのプロドラッグを含む：

式中、

$q$  は 1 または 2 である；

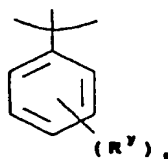
$R^1$  および  $R^3$  は、それぞれ独立してアルキルである；

$R^3$  は、ヒドロキシである；

$R^4$  および  $R^6$  は水素である；

$R^5$  は以下の式 (II) を有する：

#### 【化13】



式中、 $t$  は 0 ～ 5 までの整数である；

一つまたはそれ以上の $R^y$ は、水素；ハロゲン；-CN；-NO<sub>2</sub>；オキシ；アルキル；ポリアルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；ポリエーテル；-OR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-SR<sup>13</sup>；-S(O)R<sup>13</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>OR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>13</sup>；-OM；-SO<sub>2</sub>OM；-SO<sub>2</sub>NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-C(O)OM；-COR<sup>13</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>C(O)NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-OC(O)R<sup>13</sup>；-OC(O)NR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SOR<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>；-NR<sup>13</sup>SONR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-NR<sup>13</sup>SO<sub>2</sub>NR<sup>14</sup>R<sup>15</sup>；-P(O)R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-PR<sup>13</sup>R<sup>14</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>；-P(OR<sup>13</sup>)OR<sup>14</sup>；-S<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>A<sup>-</sup>；および-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $R^y$ ラジカルは、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキルおよびポリエーテル置換基は、選択的に、-CN；ハロゲン；ヒドロキシ；オキシ；アルキル；シクロアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリル；-OR<sup>7</sup>；-NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-SR<sup>7</sup>；-S(O)R<sup>7</sup>；-SO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-SO<sub>3</sub>R<sup>9</sup>；-CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>；-CONR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；-P(O)R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-PR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>A<sup>-</sup>；および-P(O)(OR<sup>7</sup>)OR<sup>8</sup>からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによってさらに置換してもよい；ならびに

式中、 $R^y$ ラジカルは、アルキル、ポリアルキル、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロシクリル、四級ヘテロシクリル、アリールアルキル、ヘテロシクリルアルキル、およびポリエーテル置換基は、選択的に、-O-；-NR<sup>7</sup>-；-N<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-S<sup>+</sup>R<sup>7</sup>A<sup>-</sup>-；-PR<sup>7</sup>-；-P(O)R<sup>7</sup>-；-P<sup>+</sup>R<sup>7</sup>R<sup>8</sup>A<sup>-</sup>-；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、R<sup>7</sup>およびR<sup>8</sup>は、水素；アルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；およびヘテロシクリルからなる群より独立して選択される；ならびに

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、およびR<sup>15</sup>は、水素；アルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四

級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルからなる群より独立して選択される；または

式中、 $R^{13}$ および $R^{14}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、オキソ、カルボキシ、および四級塩からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって選択的に置換される、単環式もしくは多環式ヘテロシクリルを形成する；または

式中、 $R^{14}$ および $R^{15}$ は、それらが結合する窒素原子と共に、環状環を形成する；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、ハロゲン；-CN；スルホ；オキソ；アルキル；ハロアルキル；ヒドロキシアルキル；スルホアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリルアルキル；カルボキシ；カルボキシアルキル；グアニジニル； $-OR^{16}$ ； $-NR^9R^{10}$ ； $-N^+R^9R^{10}R^wA^-$ ； $-SR^{16}$ ； $-S(O)R^9$ ； $-SO_2R^9$ ； $-SO_3R^{16}$ ； $-CO_2R^{16}$ ； $-CONR^9R^{10}$ ； $-SO_2NR^9R^{10}$ ； $-PO(OR^{16})OR^{17}$ ； $-PR^9R^{10}$ ； $-P^+R^9R^{10}R^{11}A^-$ ； $-S^+R^9R^{10}A^-$ ；および炭化水素残基からなる群より選択される一つまたはそれ以上のラジカルによって置換してもよい；ならびに

式中、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ のアルキル；ハロアルキル；シクロアルキル；ポリアルキル；アルケニル；アルキニル；アリール；ヘテロシクリル；四級ヘテロシクリル；アリールアルキル；ヘテロシクリルアルキル；四級ヘテロシクリルアルキル；アルキルアリールアルキル；アルキルヘテロシクリルアルキル；アルキルアンモニウムアルキル；アミノカルボニルアルキル；アルキルアミノカルボニル

ルアルキル；カルボキシアルキルアミノカルボニルアルキル；およびポリエーテルラジカルは、選択的に、 $-O-$ ； $-NR^9-$ ； $-N^+R^9R^{10}A^-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-S^+R^9A^{--}$ ； $-PR^9-$ ； $-P^+R^9R^{10}A^-$ ； $-P(O)R^9-$ ；フェニレン；炭化水素残基；アミノ酸残基；ペプチド残基；またはポリペプチド残基によって置換された一つもしくはそれ以上の炭素を有してもよい；ならびに

式中、 $R^{16}$ および $R^{17}$ は、 $R^9$ および $M$ からなる群より独立して選択される；ならびに

式中、 $M$ は、薬学的に許容される陽イオンである；ならびに

式中、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^w$ 、および $A^-$ は、式Iの化合物に関して先に述べた通りである；ならびに

$R^w$ は、水素；アルキル；およびアラルキルからなる群より選択される；ならびに

一つまたはそれ以上の $R^x$ ラジカルは、アルコキシ、アルキルアミノ、およびジアルキルアミノからなる群より独立して選択される。

#### 【0047】

式Iの特に重要な特定の化合物ファミリーには、以下の化合物、およびその薬学的に許容される塩が含まれる：

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-メチル-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

5-クロロ-N-[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ペンタナミド；

5-[[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-イル]フェニル]アミノ]-N, N-N-トリエチル-5-オキソ-ペンタナミニウムトリフルオロアセテート；

2-クロロ-N-[3-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フ

エニル]アセトアミド；

2-[3-[4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-イル]フェニル]アミノ]-N, N-N-トリエチル-2-オキソ-エタナミニウムクロライド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-((2-ヨードエトキシ)エトキシ)エトキシ)フェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

1-[2-[2-[2-[4-[4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]エチル]ピリジニウム；

2-[2-[2-[4-[4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N, N, N-トリエチルエタナミニウムイオダイド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-メトキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシドおよび(4S, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド；

5-ブromo-N-[3-[4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ペンタナミド；

5-[3-[4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒ

ドロキシ-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N, N, N-トリエチル-5-オキソ-1-ペンタナミニウムトリフルオロアセテート ;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-フェニル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド ;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド

2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N, N, N-トリエチルエタナミニウムイオダイド ;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド ;

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-5-[3-(エチルアミノ)フェニル]-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド ;

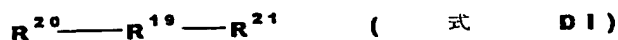
(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール1, 1-ジオキシド ; および

(4R, 5R)-7-(ジメチルアミノ)-2-エチル-4, 5-ジヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-スピロ[1, 2-ベンゾチアゼピン3(2H), 1'-シクロペンタン]-4-オール1, 1-ジオキシド。

## 【0048】

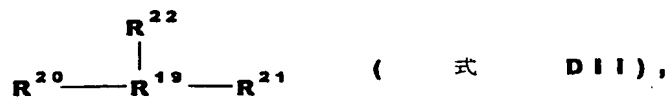
本発明は、以下から選択される化合物をさらに含む :

## 【化14】



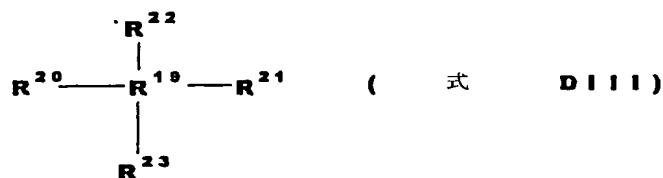
## 【化15】





及び

【化16】



式中、 $\text{R}^{19}$ は、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基からなる群より選択される；ならびに

式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、 $-\text{O}-$ ； $-\text{NR}^7-$ ； $-\text{NR}^7\text{R}^8\text{A}^-$ ； $-\text{S}-$ ； $-\text{SO}-$ ； $-\text{SO}_2-$ ； $-\text{S}^+\text{R}^7\text{A}^-$ ； $-\text{PR}^7-$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^7-$ ； $-\text{P}^+\text{R}^7\text{R}^8\text{A}^-$ ；またはフェニレンによって置換された一つもしくはそれ以上の炭素原子を有してもよい；および

式中、アルカンジイル、アルケンジイル、アルキンジイル、ポリアルカンジイル、アルコキシジイル、ポリエーテルジイル、ポリアルコキシジイル、炭化水素残基、アミノ酸残基、ペプチド残基、およびポリペプチド残基は、選択的に、アルキル；アルケニル；ポリアルキル；ポリエーテル；アリール；ハロアルキル；シクロアルキル；ヘテロシクリル；アリールアルキル；ハロゲン；オキソ； $-\text{OR}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{SR}^{13}$ ； $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{SO}_3\text{R}^{13}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{OR}^{14}$ ； $-\text{NR}^{13}\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ ； $-\text{NO}_2$ ； $-\text{CO}_2\text{R}^{13}$ ； $-\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{OM}$ ； $-\text{SO}_2\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{C}(\text{O})\text{OM}$ ； $-\text{COR}^{13}$ ； $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{PR}^{13}\text{R}^{14}$ ； $-\text{P}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{A}^-$ ； $-\text{P}(\text{OR}^{13})\text{OR}^{14}$ ； $-\text{S}^+\text{R}^{13}\text{R}^{14}\text{A}^-$ ；およ

び-N<sup>+</sup>R<sup>13</sup>R<sup>14</sup>R<sup>15</sup>A<sup>-</sup>からなる群より独立して選択される一つもしくはそれ以上のラジカルによって置換しうる；

式中、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>、MおよびA<sup>-</sup>は式Iの化合物に関して先に記載したとおりである；ならびに

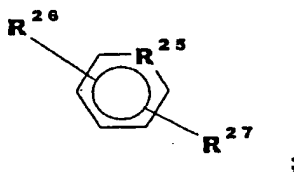
式中、R<sup>19</sup>は、それによってR<sup>19</sup>が、式DIの化合物では、R<sup>20</sup>および／またはR<sup>21</sup>に；式DIIの化合物ではR<sup>20</sup>、R<sup>21</sup>および／またはR<sup>22</sup>に；そして式DIIIの化合物ではR<sup>20</sup>、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>および／またはR<sup>23</sup>に結合する機能的結合をさらに含みうる；ならびに

式中、R<sup>20</sup>、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、およびR<sup>23</sup>のそれぞれは、理想的な胆汁酸輸送を阻害するために治療的に有用である、上記のベンゾチアゼピン部分を含む。

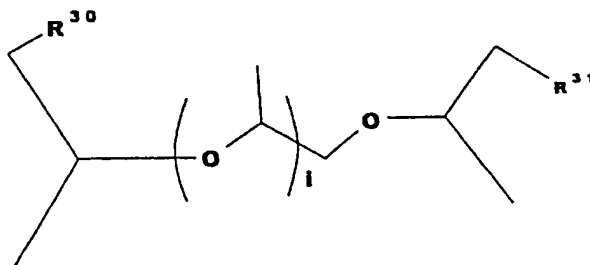
#### 【0049】

例としてのR<sup>19</sup>置換基には以下が含まれるがこれらに限定しない：

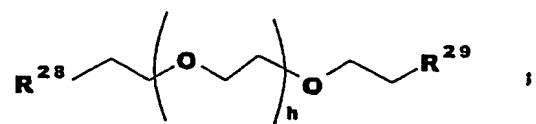
#### 【化17】



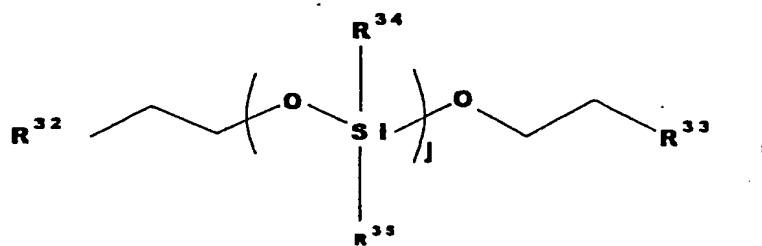
#### 【化18】



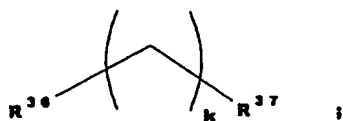
#### 【化19】



【化20】



【化21】



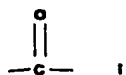
式中、

R<sup>25</sup>は、炭素および窒素からなる群より選択される；ならびにR<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>、R<sup>28</sup>、R<sup>29</sup>、R<sup>30</sup>、R<sup>31</sup>、R<sup>32</sup>、R<sup>33</sup>、R<sup>34</sup>、R<sup>35</sup>、R<sup>36</sup>、およびR<sup>37</sup>は、以下からなる群より独立して選択される：

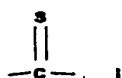
【化22】



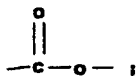
【化23】



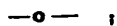
【化 2 4】



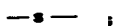
【化 2 5】



【化 2 6】



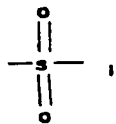
【化 2 7】



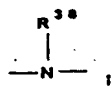
【化 2 8】



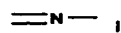
【化 2 9】



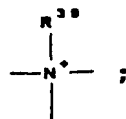
【化 3 0】



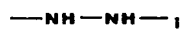
【化31】



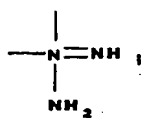
【化32】



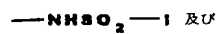
【化33】



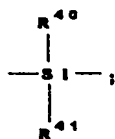
【化34】



【化35】



【化36】



式中、 $R^{38}$ 、 $R^{39}$ 、 $R^{40}$ 、および $R^{41}$ は、アルキル、アルケニル、アルキルアリー

ル、アリール、アリールアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクリル、およびヘテロシクリルアルキルからなる群より独立して選択される；

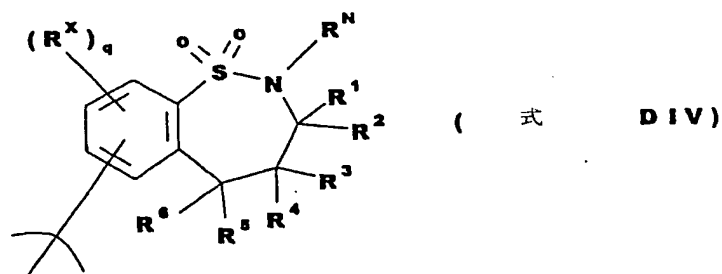
A<sup>-</sup>は、薬学的に許容される陰イオンである；ならびに

h、i、j、およびkは、1から10までの整数からなる群より独立して選択される。

### 【0050】

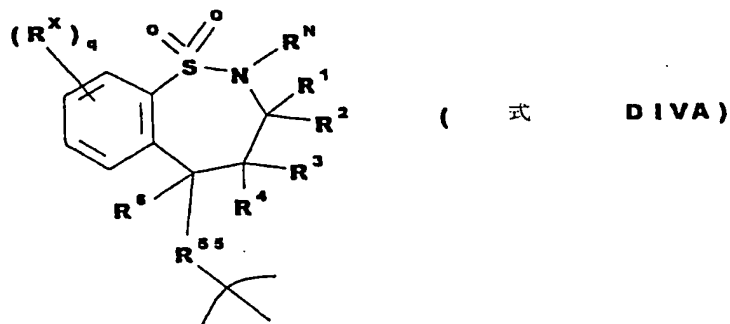
本発明は同様に、R<sup>20</sup>、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、およびR<sup>23</sup>のそれぞれが式DIVまたは式DIVAに対応するベンゾチアゼピン部分を含む、式DI、式DII、および式DIIIから選択される化合物にも向けられる：

### 【化37】



又は；

### 【化38】



式中、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>N</sup>、R<sup>x</sup>、q、およびnは式Iの化合物に関して先に定義した通りであり、そしてR<sup>55</sup>は、共有結合またはアリーレンのいずれか

である。

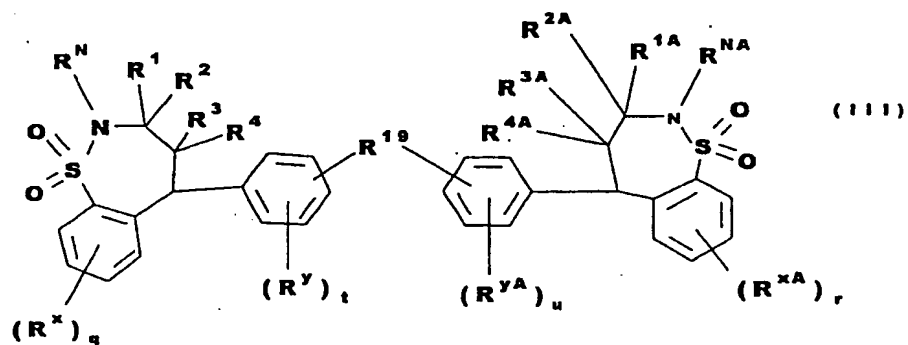
【0051】

式DIVの化合物において、式DI、DIIおよびDIIIにおける $R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ および $R^{23}$ のそれぞれは、 $R^{19}$ に対してその7-または8-位で結合することが特に好ましい。式DIVAの化合物において、 $R^{55}$ は、 $R^{19}$ に対してそのm-またはp-位で結合するフェニレン部分を含むことが特に好ましい。

【0052】

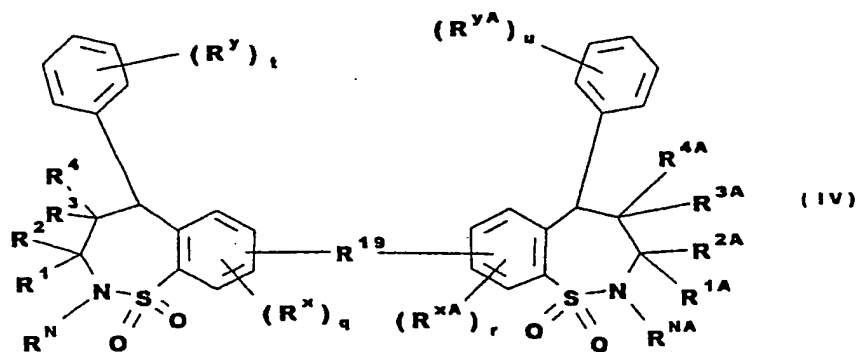
式DIの例には以下が含まれる：

【化39】



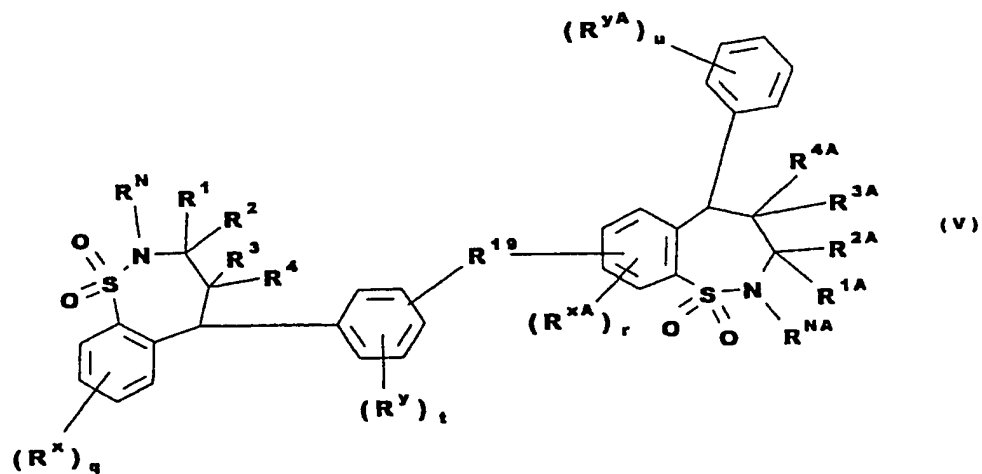
及び

【化40】



及び

【化41】



式中、R<sup>1A</sup>、R<sup>2A</sup>、R<sup>3A</sup>、R<sup>4A</sup>、R<sup>NA</sup>、R<sup>yA</sup>、R<sup>xA</sup>、r、およびuはそれぞれ、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>NA</sup>、R<sup>y</sup>、R<sup>x</sup>、qおよびtに関して先に説明した定義と同じである。

【0053】

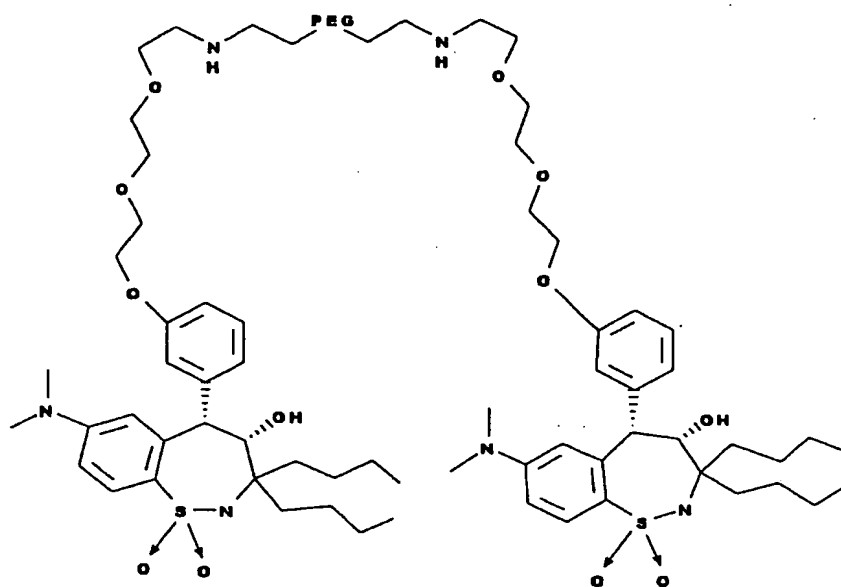
本発明の如何なる化合物においても、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、他の組合せの中でも、エチル/ブチル、またはブチル/ブチルとなりうる。

【0054】

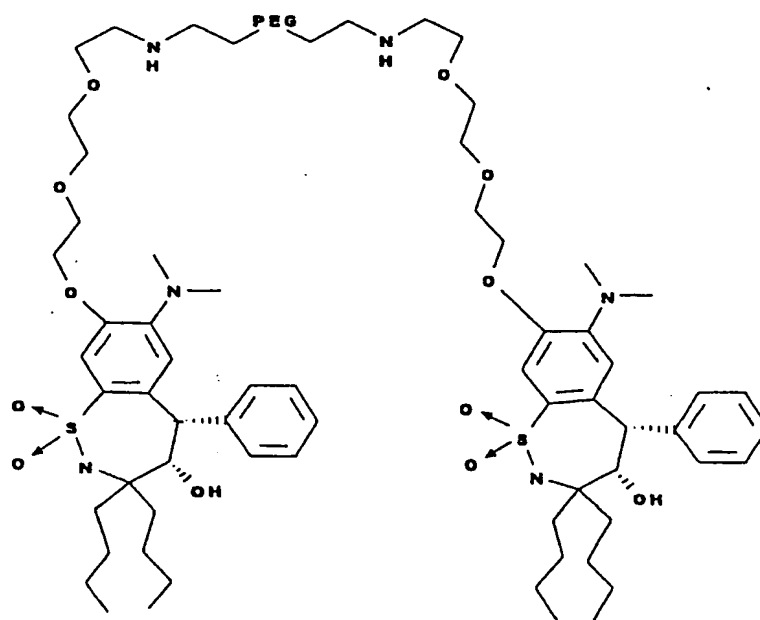
二量体化合物の例には以下が含まれる：



【化42】



【化43】



【0055】

もう一つの態様において、式DI、DII、およびDIIIにおいて本明細書に考察するように、コア部分の骨格である $R^{19}$ は、コア部分骨格内の多数の官能基を通じて、上記のように、4つ以上の懸垂する活性ベンゾチアゼピン単位、すなわち $R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、および $R^{23}$ 、によって多数置換しうる。コア部分骨格単位 $R^{19}$ は、単一のコア部分単位、その多量体、および本明細書に記載の異なるコア部分単位の多量体混合物、すなわち、単独または組合せを含みうる。個々のコア部分骨格単位の数、約1～約100単位、好ましくは約1～約80単位、より好ましくは約1～約50単位、およびさらにより好ましくは約1～約25単位の範囲となりうる。単一のコア部分骨格単位内の類似または異なる懸垂活性ベンゾチアゼピンの接合点の数は、約1～約100個、好ましくは約1～約80個、より好ましくは約1～約50個、およびさらにより好ましくは約1～約25個の範囲となりうる。そのような接合点は、 $R^{19}$ の定義によって含まれる如何なる基の中のC、S、O、N、またはPとの結合を含みうる。

#### 【0056】

$R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、および／または $R^{23}$ を含むより好ましいベンゾチアゼピン部分は、式Iに関して概要したように、好ましい構造に適合する。それぞれのベンゾチアゼピン部分の3-位の炭素は、アキラルとなりえて、置換基 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、および $R^x$ は、上記のように好ましい基と置換基の組合せから選択することができる。コア構造は、例えば、ポリ（オキシアルキレン）、またはオリゴ（オキシアルキレン）、特にポリもしくはオリゴ（オキシエチレン）、またはポリもしくはオリゴ（オキシプロピレン）を含みうる。

#### 【0057】

##### 治療方法

もう一つの局面において、本発明は、高脂血症病態、例えばアテローム性動脈硬化症のような、胆汁酸輸送阻害剤が適応される疾患、病態、および／または障害の予防および／または治療のための薬学的組成物を提供する。そのような組成物は、上記に開示の化合物を、血液中の胆汁酸レベルを低下させるために、または消化系の膜を通過するその輸送を減少させるために、有効な量で、単独もしくは併用して、例えば一つもしくはそれ以上の薬学的に許容される担体、賦形剤、

および／または希釈剤を含む組成物において、含む。直前に記載した二量体または多量体構造のいずれにおいても、例えば、本発明のベンゾチアゼピン化合物は、単独で、または様々な組合せにおいて用いることができる。

#### 【0058】

さらなる局面において、本発明はまた、本発明の化合物を単位投与剤形または分割用量での有効量をそれを必要とする患者に投与する段階を含む、胆汁酸輸送阻害剤が適応されるヒトを含む哺乳類における疾患、病態、および／または障害を治療する方法を提供する。

#### 【0059】

またさらなる局面において、本発明は、胆汁酸輸送阻害剤が適応される疾患、病態および／または障害の予防および／または治療にとって有用な薬剤の調製に、式Iの化合物および／または式DI、DII、および／またはDIIIの二量体または多量体化合物を使用することを含む。

#### 【0060】

式Iの化合物は胆石の予防および／または治療にとっても有用である。

#### 【0061】

なおさらなる局面において、本発明はまた、本発明の化合物を調製するプロセスを提供する。

#### 【0062】

本発明の適応可能性のさらなる範囲は、下記に提供する詳細な説明から明らかとなるであろう。しかし、様々な変更および改変は、本発明の精神および範囲に含まれ、それらはこの詳細な説明を読むことによって、当業者に明らかとなるであろうため、本発明の好ましい態様を示す以下の詳細な説明および実施例は、説明のために提供されると解釈されるべきである。

#### 【0063】

##### 定義および略号

読者が下記の詳細な説明を理解する一助として、下記の定義を提供する。

#### 【0064】

「ヒドロカルビル」という用語は、独占的に元素炭素および水素からなるラジ

カルを意味する。これらのラジカルは、例えば、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル、アルキニル、およびアリール部分を含む。これらのラジカルは、更に他の脂肪族または環式炭化水素基、例えばアルカリル、アルケナリルおよびアルキナリルなどで置換されたアルキル、シクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル、アルキニル、およびアリール部分を意味する。好ましくは、これらの部分は、1～20個の炭素原子を含む。

#### 【0065】

「置換されたヒドロカルビル」という用語は、ハロゲン、酸素、窒素、イオウ、およびリンなどであるが、これらに限定されるものではないような少なくとも1個の炭素以外の原子を含む基で置換されたヒドロカルビルラジカルを意味する。このような置換されたヒドロカルビルの例は、低級アルコキシ、例えばメトキシ、エトキシおよびブトキシ；例えば塩素およびフッ素のようなハロゲン；エーテル；アセタール；ケタール；エステル；フリルおよびチエニルのようなヘテロ環；アルカノキシ；ヒドロキシ；保護されたヒドロキシ；アシル；アシルオキシ；ニトロ；シアノ；アミノ；およびアミドなどの基であるが、これらに限定されるものではないような基で置換されたヒドロカルビルラジカルを含む。置換されたヒドロカルビルは、更に炭素鎖原子が窒素、酸素、イオウ、またはハロゲンのようなヘテロ原子で置換されたヒドロカルビルラジカルも含む。

#### 【0066】

「アルキル」という用語は、単独でまたは「ハロアルキル」および「ヒドロキシアルキル」のように他の用語内のいずれかにおいて使用される、1～約20個の炭素原子、または好ましくは1～約12個の炭素原子を含む直鎖または分枝鎖のラジカルを包含する。より好ましいアルキルラジカルは、1～約6個の炭素原子を有する「低級アルキル」ラジカルである。このようなラジカルの例は、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソアミル、ヘキシルなどを含む。更により好ましくは、1～3個の炭素原子を有する低級アルキルラジカルである。

#### 【0067】

「アルケニル」という用語は、単独でまたは「アリールアルケニル」のような

他の用語内のいずれかにおいて使用され、これは2～約20個の炭素原子、または好ましくは2～約12個の炭素原子の少なくとも1個の炭素-炭素二重結合を有する直鎖または分枝鎖のラジカルを包含している。より好ましいアルケニルラジカルは、2～約6個の炭素原子を有する「低級アルケニル」ラジカルである。アルケニルラジカルの例は、エテニル、プロペニル、アリル、プロペニル、ブテニル、および4-メトキシブテニルである。

#### 【0068】

「アルケニル」および「低級アルケニル」という用語は、「cis」および「trans」配向を有するか、あるいは、「E」および「Z」配向を有するラジカルを含む。

#### 【0069】

「アルキニル」という用語は、2～約20個の炭素原子、または好ましくは2～約12個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のラジカルを意味する。より好ましいアルキニルラジカルは、2～約10個の炭素原子を有する「低級アルキニル」ラジカルである。最も好ましい低級アルキニルラジカルは、2～約6個の炭素原子を有する。このようなラジカルの例は、プロパルギル、ブチニルなどを含む。

#### 【0070】

「シクロアルキル」という用語は、3～約12個の炭素原子を有する飽和した炭素環式ラジカルを包含している。より好ましいシクロアルキルラジカルは、3～約10個の炭素原子を有する「低級シクロアルキル」ラジカルである。このようなラジカルの例は、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチルおよびシクロヘキシルを含む。「シクロアルキル」という用語は更に、シクロアルキル環がベンゾチアゼピンの7員ヘテロ環と炭素環の原子を共有しているスピロシステムを包含している。

#### 【0071】

「シクロアルケニル」という用語は、3～12個の炭素原子を有する一部不飽和の炭素環式ラジカルを包含している。2個の二重結合(これは共役していてもしていなくとも良い)を含む部分的に不飽和の炭素環式ラジカルであるシクロアルケニルラジカルを「シクロアルキルジエニル」と称することができる。より好まし

いシクロアルケニルラジカルは、4～約10個の炭素原子を有する「低級シクロアルケニル」ラジカルである。このようなラジカルの例は、シクロブテニル、シクロペンテニルおよびシクロヘキセニルである。

#### 【0072】

「ハロ」および「ハロゲン」という用語は、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素原子のようなハロゲンを意味する。「ハロアルキル」という用語は、いずれか1個またはそれ以上のアルキル炭素原子が先に定義されたハロで置換されているようなラジカルを包含している。具体的に包含しているのは、モノハロアルキル、ジハロアルキル、およびポリハロアルキルラジカルである。例えばモノハロアルキルラジカルは、ラジカル内にヨウ素、臭素、塩素またはフッ素原子のいずれかを有することができる。ジハロおよびポリハロアルキルラジカルは、同じハロゲン原子を2個もしくはそれ以上または異なるハロラジカルの組合せを有することができる。「低級ハロアルキル」は、1～6個の炭素原子を有するラジカルを包含している。ハロアルキルラジカルの例は、フルオロメチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、クロロメチル、ジクロロメチル、トリクロロメチル、ペンタフルオロエチル、ヘプタフルオロプロピル、ジフルオロクロロメチル、ジクロロフルオロメチル、ジフルオロエチル、ジフルオロプロピル、ジクロロエチルおよびジクロロプロピルである。「ペルフルオロアルキル」とは、全て水素原子がフッ素原子で置換されているアルキルラジカルを意味する。例としては、トリフルオロメチルおよびペンタフルオロエチルを含む。

#### 【0073】

「ヒドロキシアルキル」という用語は、いずれか1個が1個もしくはそれ以上のヒドロキシラジカルで置換され得るような1～約10個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキルラジカルを包含している。より好ましいヒドロキシアルキルラジカルは、1～6個の炭素原子および1個もしくはそれ以上のヒドロキシラジカルを有する「低級ヒドロキシアルキル」ラジカルである。このようなラジカルの例は、ヒドロキシメチル、ヒドロキシエチル、ヒドロキシプロピル、ヒドロキシブチルおよびヒドロキシヘキシルを含む。さらにより好ましいのは、1～3個の炭素原子を有する低級ヒドロキシアルキルラジカルである。

## 【0074】

「アリアル」という用語は、単独でまたは組合せて、このような環がペンダント法で互いに結合し得るかまたは融合し得るような、1個もしくはそれ以上の環を含む炭素環式芳香族システムを意味する。「アリアル」という用語は、フェニル、ナフチル、テトラヒドロナフチル、インダン、ビフェニル、およびアントラセニルのような、芳香族ラジカルを包含している。より好ましいアリアルは、フェニルである。該「アリアル」基は、低級アルキル、ヒドロキシ、ハロ、ハロアルキル、ニトロ、シアノ、アルコキシおよび低級アルキルアミノのような、1～3個の置換基を有してもよい。

## 【0075】

「ヘテロ環式」という用語は、飽和、一部飽和、および不飽和のヘテロ原子を含有する環状ラジカルであり、ここでヘテロ原子は、窒素、イオウおよび酸素から選択され得るものを包含している。好ましいヘテロ環式は、3～10員環のヘテロ環、特に5～8員環のヘテロ環である。飽和ヘテロ環式ラジカルの例は、1～4個の窒素原子を含む飽和した3～6員のヘテロ単環基[例えば、ピロリジニル、イミダゾリジニル、ピペリジノ、ピペラジニル]；1～2個の酸素原子および1～3個の窒素原子を含む飽和した3～6員のヘテロ単環基[例えば、モルホリニル]；1～2個のイオウ原子および1～3個の窒素原子を含む飽和した3～6員のヘテロ単環基[例えば、チアゾリジニル]を含む。部分的に飽和したヘテロ環式ラジカルの例は、ジヒドロチオフェン、ジヒドロピラン、ジヒドロフランおよびジヒドロチアゾールを含む。不飽和のヘテロ環式ラジカルで、「ヘテロアリアル」ラジカルとも称されるものの例は、1～4個の窒素原子を含む不飽和の5～6員のヘテロ単環基、例えば、ピロリニル、イミダゾリル、ピラゾリル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、ピリミジル、ピラジニル、ピリダジニル、トリアゾリル[例えば、4H-1, 2, 4-トリアゾリル、1H-1, 2, 3-トリアゾリル、2H-1, 2, 3-トリアゾリル]；1～5個の窒素原子を含む不飽和の縮合したヘテロ環式基、例えば、インドリル、イソインドリル、インドリジニル、ベンズイミダゾリル、キノリル、イソキノリル、インダゾリル、ベンゾトリアゾリル、テトラゾロピリダジニル[例えば、テトラゾロ[1, 5-b]ピリダジニル]；酸素原子を含む不飽和の3～6員のヘテロ単環基、例え

ば、ピラニル、2-フリル、3-フリルなど；イオウ原子を含む不飽和の5～6員のヘテロ単環基、例えば、2-チエニル、3-チエニルなど；1～2個の酸素原子および1～3個の窒素原子を含む不飽和の5員または6員のヘテロ単環基、例えば、イソオキサゾリル、オキサジアゾリル[例えば、1,2,4-オキサジアゾリル、1,3,4-オキサジアゾリル、1,2,5-オキサジアゾリル]；1～2個の酸素原子および1～3個の窒素原子を含む不飽和の縮合したヘテロ環式基[例えば、ベンズオキサゾリル、ベンズオキサジアゾリル]；1～2個のイオウ原子および1～3個の窒素原子を含む不飽和の5～6員のヘテロ単環基、例えばチアゾリル、チアジアゾリル[例えば、1,2,4-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,5-チアジアゾリル]；1～2個のイオウ原子および1～3個の窒素原子を含む不飽和の縮合したヘテロ環式基[例えば、ベンゾチアゾリル、ベンゾチアジアゾリル]などを含む。この用語はさらに、ヘテロ環式ラジカルがアリールラジカルに融合されているようなラジカルも包含している。このような融合二環式ラジカル例は、ベンゾフラン、ベンゾチオフェンなどがある。該「ヘテロ環式」基は、低級アルキル、ヒドロキシ、オキソ、アミノおよび低級アルキルアミノのような、1～3個の置換基を含むことができる。

#### 【0076】

ヘテロ環式ラジカルは、融合されたまたはされないラジカル、特に3～10員の融合されたまたはされないラジカルを含むことができる。好ましいヘテロアリールラジカル例は、ベンゾフリル、2,3-ジヒドロベンゾフリル、ベンゾチエニル、インドリル、ジヒドロインドリル、クロマニル、ベンゾピラン、チオクロマニル、ベンゾチオピラン、ベンゾジオキサニル、ベンゾジオキサニル、ピリジル、チエニル、チアゾリル、フリルおよびピラジニルを含む。より好ましいヘテロアリールラジカルは、イオウ、窒素および酸素から選択された1または2個のヘテロ原子を含む5員または6員のヘテロアリールを含み、これはチエニル、フラニル、チアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、イソオキサゾリル、イソチアゾリル、ピリジル、ピペリジニルおよびピラジニルから選択される。

#### 【0077】

「ヘテロアリール」という用語は、完全に不飽和のヘテロ環式を意味する。



## 【0078】

「ヘテロ環式」または「ヘテロアリール」のいずれかにおいて、対象となる分子への結合点は、ヘテロ原子または環内のいずれかの位置であることができる。

## 【0079】

「トリアゾリル」という用語は、全ての位置において異性体を含む。1個より多い環上ヘテロ原子を含み、かつそれについて異性体が可能であるような全てのその他のヘテロ環式およびヘテロアリールにおいては、このような異性体は、該ヘテロ環およびヘテロアリールの定義に含まれる。

## 【0080】

「第四級ヘテロ環」という用語は、1個またはそれ以上のヘテロ原子、例えば、窒素、イオウ、リンまたは酸素が、正荷電されている多くの結合を有するようなヘテロ環を意味する(その結果、この用語は、第三級(ternary)および第四級の正荷電されている両構造を包含することが意図されている)。第四級ヘテロ環の関心のある分子への結合点は、ヘテロ原子またはいずれか他の部位であることができる。

## 【0081】

「第四級ヘテロアリール」という用語は、1個またはそれ以上のヘテロ原子、例えば、窒素、イオウ、リンまたは酸素が、正荷電されている多くの結合を有するようなヘテロアリールを意味する(その結果、この用語は、第三級(ternary)および第四級の正荷電されている両構造を包含することが意図されている)。第四級ヘテロアリールの関心のある分子への結合点は、ヘテロ原子またはいずれか他の部位であることができる。

## 【0082】

「ジイル」という用語は、該部分が対象となる分子へ結合する2点を有するジラジカル部分を意味する。

## 【0083】

「オキソ」という用語は、二重結合した酸素を意味する。

## 【0084】

「ポリアルキル」という用語は、分子量が約20,000まで、より好ましくは約10

,000まで、および最も好ましくは約5,000までを有する、分枝したまたは線状の炭化水素鎖を意味する。

#### 【0085】

「ポリエーテル」という用語は、1個またはそれ以上の炭素が酸素で置換されたポリアルキルを意味し、ここでポリエーテルの分子量は約20,000まで、より好ましくは約10,000まで、および最も好ましくは約5,000までである。

#### 【0086】

「ポリアルコキシ」という用語は、アルキレンオキシドのポリマーを意味し、ここでポリアルコキシの分子量は約20,000まで、より好ましくは約10,000まで、および最も好ましくは約5,000までである。

#### 【0087】

「炭水化物残基」という用語は、単糖、二糖、三糖、四糖および多糖のようなものであるが、これらに限定されるものではない炭水化物に由来した残基を包含しており、ここで多糖は分子量が約20,000までであり、例えば、ヒドロキシプロピル-メチルセルロースまたはキトサン残基；3～7個の炭素原子を伴い、かつD型またはL型に属する、アルドースおよびケトースに由来した化合物；アミノ糖；糖アルコール；ならびにサッカリン酸を包含している。このような炭水化物の限定的でない具体的な例は、グルコース、マンノース、フルクトース、ガラクトース、リボース、エリトロース、グリセリンアルデヒド、セドヘプツロース、グルコサミン、ガラクトサミン、グルクロン酸、ガラクトン酸、グルコン酸、ガラクトン酸、マンノン酸、グルカミン、3-アミノ-1,2-プロパンジオール、グルカル酸およびガラクトル酸を含む。

#### 【0088】

「ペプチド残基」という用語は、最大約100個のアミノ酸ユニットを含む、ポリアミノ酸残基を意味する。

#### 【0089】

「ポリペプチド残基」という用語は、約100個のアミノ酸ユニットから約1000個のアミノ酸ユニット、より好ましくは約100個のアミノ酸ユニットから約750個のアミノ酸ユニット、および最も好ましくは約100個のアミノ酸ユニットから約5

00個のアミノ酸ユニットを含む、ポリアミノ酸残基を意味する。

【0090】

「アルキルアンモニウムアルキル」という用語は、 $-NH_2$  基または一置換、二置換、または三置換されたアミノ基を意味し、そのいずれかは、該アルキルが対象となる分子に結合されたアルキルに結合されている。

【0091】

「スルホ」という用語は、スルホ基、 $-SO_3H$ 、およびその塩を意味する。

【0092】

「スルホアルキル」という用語は、スルホネート基が結合されたアルキル基を意味し、ここで該アルキルは、対象となる分子に結合されている。

【0093】

「アラルキル」という用語は、アリール置換されたアルキルラジカルを包含している。好ましいアラルキルラジカルは、1～6個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合したアリールラジカルを有する「低級アラルキル」ラジカルである。更により好ましいのは、1～3個の炭素原子を有するアルキル部分に結合したフェニルを有する低級アラルキルラジカルである。このようなラジカルの例は、ベンジル、ジフェニルメチルおよびフェニルエチルを含む。該アルキル内のアリールは、ハロ、アルキル、アルコキシ、ハロアルコアルキルおよびハロアルコキシにより加えて置換される。「アリールアルケニル」という用語は、アリール置換されたアルケニルラジカルを包含している。好ましいアリールアルケニルラジカルは、有するアルケニルラジカルに結合したアリールラジカルを有する「低級アリールアルケニル」ラジカルである。

【0094】

「ヘテロ環式アルキル」という用語は、1個またはそれ以上のヘテロ環式基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましいヘテロ環式アルキルラジカルは、1～10個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合した1個もしくはそれ以上のヘテロ環式基を有する「低級ヘテロ環式アルキル」ラジカルである。

【0095】

「ヘテロアリールアルキル」という用語は、1個またはそれ以上のヘテロアリ

ール基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましくはヘテロアリールアルキルラジカルは、1～10個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合した1個またはそれ以上のヘテロアリール基を有する「低級ヘテロアリールアルキル」ラジカルである。

#### 【0096】

「第四級ヘテロ環式アルキル」という用語は、1個またはそれ以上の第四級ヘテロ環式基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましくは第四級ヘテロ環式アルキルラジカルは、1～10個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合した1個またはそれ以上の第四級ヘテロ環式基を有する「低級第四級ヘテロ環式アルキル」ラジカルである。

#### 【0097】

「第四級ヘテロアリールアルキル」という用語は、1個またはそれ以上の第四級ヘテロアリール基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましい第四級ヘテロアリールアルキルラジカルは、1～10個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合した1個またはそれ以上の第四級ヘテロアリール基を有する「低級第四級ヘテロアリールアルキル」ラジカルである。

#### 【0098】

「アルキルヘテロアリールアルキル」という用語は、1個またはそれ以上のアルキル基で置換されたヘテロアリールアルキルラジカルを意味する。好ましいアルキルヘテロアリールアルキルラジカルは、1～10個の炭素原子を有するアルキル部分を伴う「低級アルキルヘテロアリールアルキル」ラジカルである。

#### 【0099】

「アルコキシ」という用語は、酸素により対象となる分子に結合したアルキルラジカル、例えばメトキシラジカルを意味する。より好ましいアルコキシラジカルは、1～6個の炭素原子を有する「低級アルコキシ」ラジカルである。このようなラジカルの例は、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソ-プロポキシ、ブトキシ、およびtert-ブトキシを含む。

#### 【0100】

「カルボキシ」という用語は、カルボキシル基、 $\text{-CO}_2\text{H}$ 、またはその塩を意味

する。

#### 【0101】

「カルボキシアルキル」という用語は、1個またはそれ以上のカルボキシル基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましいカルボキシアルキルラジカルは、1～6個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合された1個またはそれ以上のカルボキシル基を有する「低級カルボキシアルキル」ラジカルである。

#### 【0102】

「カルボキシヘテロ環」という用語は、1個またはそれ以上のカルボキシル基で置換されたヘテロ環式ラジカルを意味する。

#### 【0103】

「カルボキシヘテロアリール」という用語は、1個またはそれ以上のカルボキシル基で置換されたヘテロアリールラジカルを意味する。

#### 【0104】

「カルボアルコキシアルキル」という用語は、1個またはそれ以上のアルコキシカルボニル基で置換されたアルキルラジカルを意味する。好ましいカルボアルコキシアルキルラジカルは、1～6個の炭素原子を有するアルキルラジカルに結合した1個またはそれ以上のアルコキシカルボニル基を有する「低級カルボアルコキシアルキル」ラジカルである。

#### 【0105】

「カルボキシアルキルアミノ」という用語は、例えば「アルキルアリール」または「アリールアルキル」のように、組合せて使用される場合は一置換または二置換されたアミノラジカルを意味し、前述の個々の用語は、先に記された意味を有する。

#### 【0106】

「アシル」という用語は、カルボキシル基のヒドロキシが除去された有機酸基を意味する。アシル基の例は、アセチルおよびベンゾイルを含むが、これらに限定されるものではない。

#### 【0107】

「有効化合物」という用語は、胆汁酸の輸送を阻害する本発明の化合物を意味

する。

### 【0108】

「胆汁酸輸送阻害剤」という用語は、ヒトのような哺乳類の腸から循環系への胆汁酸の吸収を阻害することが可能な化合物を意味する。これは、胆汁酸の糞便排泄を増加することに加え、コレステロールおよびコレステロールエステルの血漿または血清濃度の低下、より詳細にはLDLおよびVLDLコレステロールの低下を含む。胆汁酸輸送阻害による予防および／または治療が有益な病態および／または疾患は、例えばアテローム硬化症のような高脂血症の病態を含む。

### 【0109】

本明細書において使用される略号は以下の意味を有する：

「THF」という用語は、テトラヒドロフランを意味し；

「PTC」という用語は、相間移動触媒を意味し；

「Aliquant 336」という用語は、メチルトリカプリルイルアンモニウムクロリドを意味し；

「MCPBA」という用語は、m-クロロ過安息香酸を意味し；

「セライト」という用語は、名称ケイソウ土濾過助剤(filtering aid)を意味し；

「DMF」という用語は、ジメチルホルムアミドを意味し；

「DME」という用語は、エチレングリコールジメチルエーテルを意味し；

「BOC」という用語は、t-ブトキシカルボニルを意味し；

「Me」という用語は、メチルを意味し；

「Et」という用語は、エチルを意味し；

「Bu」という用語は、ブチルを意味し；

「EtOAc」という用語は、酢酸エチルを意味し；

「Et<sub>2</sub>O」という用語は、ジエチルエーテルを意味し；

「LAH」という用語は、水素化アルミニウムリチウムを意味し；

「DMSO」という用語は、ジメチルスルホキシドを意味し；

「KOSiMe<sub>3</sub>」という用語は、トリメチルシラノレートカリウムを意味し；

「PEG」という用語は、ポリエチレングリコールを意味し；

「MS」という用語は、質量分析を意味し；  
「HRMS」という用語は、高分解能質量分析を意味し；  
「ES」という用語は、エレクトロスプレー(electrospray)を意味し；  
「NMR」という用語は、核磁気共鳴スペクトルを意味し；  
「GC」という用語は、ガスクロマトグラフィーを意味し；  
「MPLC」という用語は、中速液体クロマトグラフィーを意味し；  
「HPLC」という用語は、高速液体クロマトグラフィーを意味し；  
「RPHPLC」という用語は、逆相高速液体クロマトグラフィーを意味し；  
「RT」という用語は、室温を意味し；  
「h」または「hr」という用語は、時間を意味し；および  
「min」という用語は、分を意味する。

#### 【0110】

##### 化合物の別形

本発明の化合物は、少なくとも2個の不斉炭素原子を有し、その結果、ラセミならびにジアステレオマーおよびエナンチオマーのような立体異性体を、純粋形および混合物の両方の形で含む。このような立体異性体は、常法を用い、エナンチオマー出発材料を反応するか、または本発明の化合物の異性体を分離するかのいずれかにより、調製および分離することができる。異性体は、例えば、二重結合を超えてcis異性体またはtrans異性体のいずれかのような、幾何学的異性体を含み得る。このような異性体は全て、本発明の化合物に置いて考察されている。

#### 【0111】

本発明の化合物は、このような化合物の互変異性体、塩、溶媒和物、およびプロドラッグも含む。

#### 【0112】

##### 化合物の合成

本発明の化合物の調製に使用される出発材料は、市販のものであるか、または当業者に公知の常法または当技術分野において説明された方法と類似の方法で調製することができる。

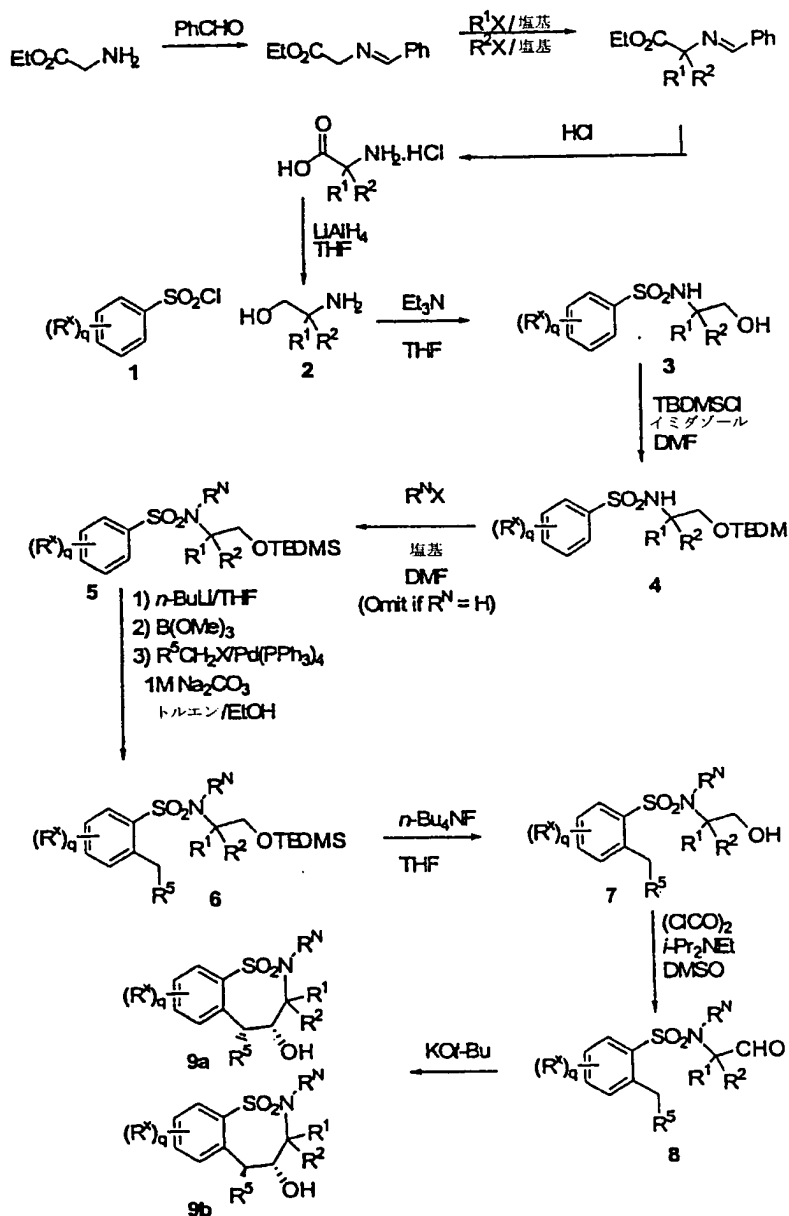
#### 【0113】

一般に、本発明の化合物は、以下に説明した方法で調製することができる。

【0114】

スキーム1

【化44】



【0115】

スキーム1は、ラセミ体のベンゾチアゼピン9aおよび9bの調製を例証している



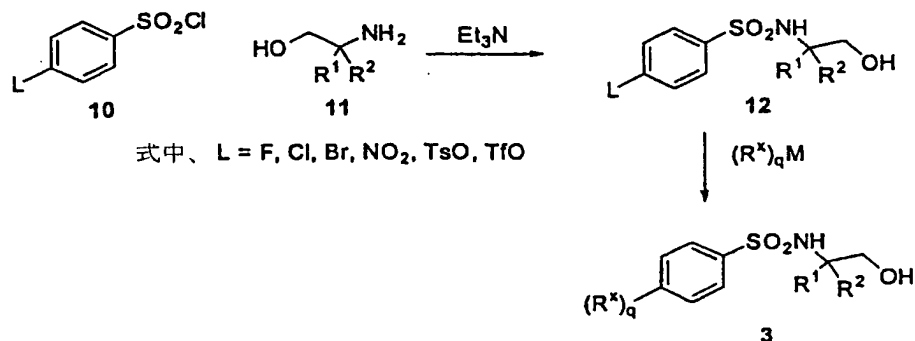
。テトラヒドロフランのような溶媒中例えばトリエチルアミンのような塩基の存在下における、ベンゼンスルホンクロリド1のアミノアルコール2との反応は、ベンゼンスルホンアミド3を生成し、これは保護されたベンゼンスルホンアミド4に転化される。保護されたベンゼンスルホンアミド4は、任意にジメチルホルムアミドのような溶媒中、水素化ナトリウムのような塩基の存在下で、ヨウ化メチルのようなハロゲン化アルキルで処理することができ、N-置換されたベンゼンスルホンアミド5を生成する。その後保護されたベンゼンスルホンアミド4またはN-置換されたベンゼンスルホンアミド5を、連続して(i)溶媒(テトラヒドロフランなど)中の強塩基(ヘキサン中のn-ブチルリチウムなど)、(ii)求電子試薬(ホウ酸トリメチルなど)、および(iii)塩基(炭酸ナトリウムなど)と、ハロゲン化ベンジル(p-メトキシベンジルクロリド)、および触媒(例えばテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0))と反応し、スルホンアミド6を生成する。テトラヒドロフランのような溶媒中のスルホンアミド6の、テトラブチルフッ化アンモニウムのようなフッ素源による処理は、脱保護されたスルホンアミドアルコール7を生じる。スルホンアミドアルコール7は、Swern酸化のような方法を用いて、連続して酸化され、スルホンアミドアルデヒド8を生成する。カリウムtert-ブトキシドのような塩基による処理時に、アルデヒド8は、ラセミ体ベンゾチアゼピン9aおよび9bに転換される。R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>N</sup>、R<sup>X</sup>およびqは、式Iの化合物について先に定義されたものである。

# 【0116】

## スキーム2

## スルホンアミドアルコールの合成別法

# 【化45】



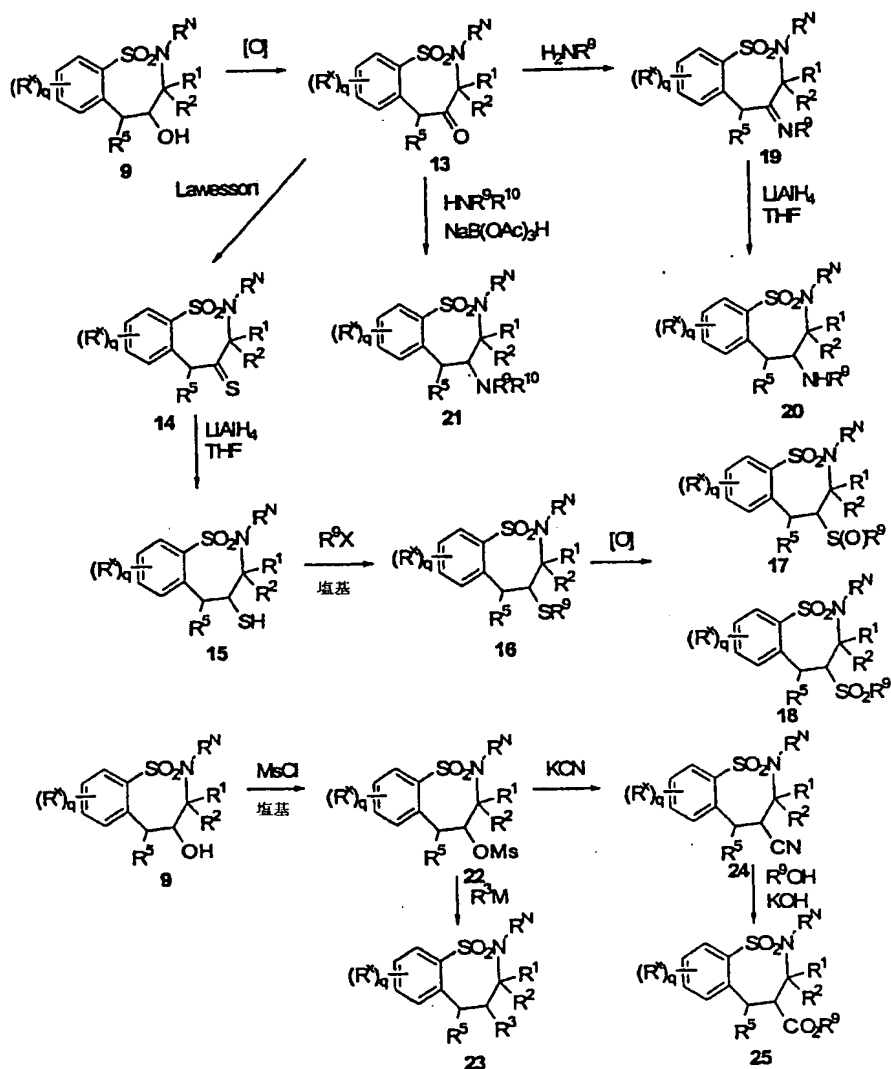
## 【0117】

スキーム2は、スキーム1において使用されたスルホンアミドアルコール3の調製の合成別法である。テトラヒドロフランのような溶媒中での、トリエチルアミンのような塩基の存在下での、ベンゼンスルホニルクロリド10とアミノアルコール11との反応は、スルホンアミド12を生成する。ベンゼンスルホニルクロリド10の置換基Lは、適当な脱離基、例えばフルオロ、クロロ、ブロモ、ニトロ、トシルオキシまたはトリフルオロメチルスルホニルオキシなどである。テトラヒドロフランのような溶媒中、トリエチルアミンのような塩基の存在下での、スルホンアミド12の、適当な求核試薬との反応は、ベンゼンスルホンアミド3を生成し、これはスキーム1に従い更に反応される。R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>x</sup>およびqは、式Iの化合物について先に定義されたものである。置換基Mは、金属、好ましくはアルカリ金属または水素である。

## 【0118】

スキーム3

【化46】



## 【0119】

スキーム3は、4位にヒドロキシ以外の置換基を有するベンゾチアゼピンの調製を例示している。

## 【0120】

4-チオキソ-、チオ-、スルフィニル-またはスルホニルベンゾチアゼピンの調製において、ベンゾチアゼピン9aまたは9bを、最初に酸化し、ベンゾチアゼピン-4-オン13とする。例えばPCCのような通常の酸化剤、またはSwern条件を使用することができる。その後ベンゾチアゼピン-4-オン13を、Lawesson試薬と反応さ

せ、4-チオキソ-ベンゾチアゼピン14を生成する。4-チオキソベンゾチアゼピン14を、テトラヒドロフランのような適当な溶媒中で、水素化リチウムアルミニウムのような適当な還元剤と反応し、4-メルカプト-ベンゾチアゼピン15を生成する。4-メルカプト-ベンゾチアゼピン15を、ジメチルホルムアミドのような適当な溶媒中で、水素化ナトリウムのような塩基の存在下で、ハロゲン化アルキルのような適当なアルキル化剤と反応し、4-アルキルチオ-ベンゾチアゼピン16を生成する。4-アルキルチオベンゾチアゼピン16を、*t*-ブチルヒドロペルオキシドまたは*m*-クロロペル安息香酸のような適当な酸化剤と反応し、連続して4-アルキルスルフィニル-ベンゾチエピン17および4-アルキルスルホニル-ベンゾチアゼピン18を生成する。

#### 【0121】

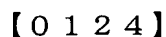
あるいは、4-アミノ-またはイミノ-ベンゾチアゼピンを、テトラヒドロフランのような適当な溶媒中で、ベンゾチアゼピン-4-オン13のアンモニアまたは1級アミンとの反応により調製し、4-イミノ-ベンゾチアゼピン19を生成することができる。4-イミノ-ベンゾチアゼピン19は、テトラヒドロフランのような適当な溶媒中で、適当な還元剤、例えば水素化リチウムアルミニウムと反応し、4-アミノ-ベンゾチアゼピン20を生成することができる。ベンゾチアゼピン-4-オン13は更に、適当な溶媒、例えばテトラヒドロフラン中で、トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウムのような還元剤の存在下で、アンモニア、第一級アミンまたは第二級アミンとの反応により還元的アルキル化を受け、4-アミノ-ベンゾチアゼピン21を生成することができる。

#### 【0122】

スキーム3は更に、4-アルキル-ベンゾチアゼピン23および4-アルコキシカルボニル-ベンゾチアゼピン25の調製を例示している。最初にベンゾチアゼピン9aまたは9bの4位のヒドロキシが、メシルオキシのような適当な脱離基に転換され、保護されたベンゾチアゼピン22を形成する。次に保護されたベンゾチアゼピン22を、テトラヒドロフランのような適当な溶媒中で、ブチルリチウムのような適当な求核試薬と反応し、4-アルキル-ベンゾチアゼピン23を生成する。あるいは、保護されたベンゾチアゼピン22を、ジメチルホルムアミドのような適当な溶媒中

**【 0 1 2 3 】**

## 【化 4 7】



— 161 —

エステル28の水酸化ナトリウムのような塩基の存在下での加水分解は、チオフェノール29を生成する。チオフェノール29は、硝酸カリウムのような酸化剤の存在下で、塩化スルホニルのようなスルホニル化試薬で処理し、スルホニルクロリド30を得る。その後スルホニルクロリド30を、テトラヒドロフランのような溶媒中で、アミノアルコールと反応し、ベンゼンスルホンアミド31を得る。ベンゼンスルホンアミド31は任意に、テトラヒドロフランのような溶媒中、イミダゾールのような塩基の存在下で、tert-ブチルジメチルシリルクロリドのようなシリル化基試薬によりヒドロキシル保護し、保護されたベンゼンスルホンアミド32を生成することができる。保護されたベンゼンスルホンアミド32は、ジメチルホルムアミドのような溶媒中、水素化ナトリウムのような塩基の存在下、ヨウ化メチルのようなハロゲン化アルキルで処理し、N-置換されたベンゼンスルホンアミド33を得た。保護されたN-置換されたベンゼンスルホンアミド33のテトラブチルアンモニウムフルオリドのようなフッ素源による脱保護は、N-置換されたベンゼンスルホンアミド34を生じる。次にベンゼンスルホンアミド31またはN-置換されたベンゼンスルホンアミド34を、適当な酸化剤またはSwern条件下で酸化し、アルデヒド35を形成する。亜鉛および三塩化チタンによるアルデヒド35の処理時に、ベンゾチアゼピン-4-エン36およびベンゾチアゼピン-4-オン37の混合物に転換される。

### 【0125】

本発明の中間体および反応生成物の、並びに特にスキーム1、2、3および4に記された中間体および反応生成物の回収、単離および精製は、沈殿、濾過、抽出またはクロマトグラフィーのような、当業者に周知の常法により行うことができる。特に記さない限りは、条件、溶媒および試薬は、通常のもの、厳密に論評されないものか、または両方のいずれかである。

### 【0126】

#### 追加の実施態様および実施例

特に興味深い化合物の他の種類は、式Iの化合物を含む(式中、R<sup>1</sup> およびR<sup>2</sup> は、置換または未置換のC<sub>1-10</sub>アルキルの中から選択され、ここで置換されたC<sub>1-10</sub>アルキルは、例えばアルキルカルボニル、アルコキシ、ヒドロキシ、および他の連

結基を介してC<sub>1-10</sub>アルキルに結合した窒素含有ヘテロ環から、個別に選択された1個またはそれ以上のラジカルを含む)。これらのR<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>置換基は、エチル、n-プロピル、n-ブチル、n-ペンチル、イソブチル、イソプロピル、-CH<sub>2</sub>C(=O)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-CH<sub>2</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、および-CH<sub>2</sub>O-(4-ピコリン)を含む。エチル、n-プロピル、n-ブチル、およびイソブチルが好ましい。本発明のある特に好ましい化合物においては、置換基R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は同一であり、例えばn-ブチル/n-ブチルであり、その結果該化合物は、3位の炭素でアキラルである。3位の炭素での光学異性の除去は、回腸胆汁酸輸送阻害剤として使用される化合物の選択、合成、分離、および量的制御を単純化する。

### 【0127】

キラル3位炭素を有する本発明の化合物に加え、アキラル3位炭素を有するものにおいて、ベンゼン(benzo)環上の置換基R<sup>x</sup>は、例えば、水素、アリール、アルキル、ヒドロキシ、ハロ、アルコキシ、アルキルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、ハロアルキル、ハロアルコキシ、(N)-ヒドロキシ-カルボニルアルキルアミノ、ハロアルキルチオ、ハロアルキルスルフィニル、ハロアルキルスルホニル、アミノ、N-アルキルアミノ、N,N-ジアルキルアミノ、(N)-アルコキシカルバモイル、(N)-アリールオキシカルバモイル、(N)-アラルキルオキシカルバモイル、トリアルキルアンモニウム(特にハロゲン化物対イオン)、(N)-アミド、(N)-アルキルアミド、N,N-ジアルキルアミド、(N)-ハロアルキルアミド、(N)-スルホンアミド、(N)-アルキルスルホンアミド、(N)-ハロアルキルスルホンアミド、カルボキシアリルアミノ、トリアルキルアンモニウム塩、(N)-カルバミン酸、アルキルまたはベンジルエステル、N-アシルアミノ、ヒドロキシルアミノ、ハロアシルアミノ、炭水化物残基、チオフエン、1個もしくはそれ以上のアルキル置換基を有するカルボン酸、またはヒドロキシ置換基を有するトリアルキルアンモニウム塩、それに置換された第四級アンモニウム塩を有するアルキレン橋、-[O(CH<sub>2</sub>)<sub>d</sub>]<sub>e</sub>-X(式中、eは2~12、dは2または3、およびXはハロまたは第四級アンモニウム塩である)、ならびに(N)-窒素含有ヘテロ環(式中、該ヘテロ環の窒素は任意に第四級化されている。)を含むことができる。

### 【0128】

$R^x$  を構成する好ましい種は、メチル、エチル、イソプロピル、*t*-ブチル、ヒドロキシ、メトキシ、エトキシ、イソプロポキシ、メチルチオ、ヨージド、ブロモ、ブロモ、フルオロ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、エチルチオ、アミノ、ヒドロキシアミノ、*N*-メチルアミノ、*N,N*-ジメチルアミノ、*N,N*-ジエチルアミノ、(N)-ベンジルオキシカルバモイル、トリメチルアンモニウム $A^-$ 、 $-NHC(=O)CH_3$ 、 $-NHC(=O)C_5H_{11}$ 、 $-NHC(=O)C_6H_5$ 、カルボキシエチルアミノ、(N)-モルホリニル、(N)-アゼチジニル、(N)-*N*-メチルアゼチジニウム $A^-$ 、(N)-ピロリジニル、ピロリル、(N)-*N*-メチルピリジニウム $A^-$ 、(N)-*N*-メチルモルホリニウム $A^-$ 、および*N-N'*-メチルピペリジニル、(N)-ブロモメチルアミド、(N)-*N*-ヘキシルアミノ、チオフエン、 $N^+(CH_3)_2CO_2H$   $I^-$ 、 $-NCH_3CH_2CO_2H$ 、 $-(N)-N'$ -ジメチルピペラジニウム $I^-$ 、(N)-*t*-ブチルオキシカルバモイル、(N)-メチルスルホンアミド、(N)-*N'*-メチルピロリジニウム、および $-(OCH_2CH_2)_3$   $I^-$  (式中、 $A^-$  は薬学的に許容される陰イオンである。)である。

#### 【0129】

ベンゼン環は、6位、7位または8位で一置換されるか、もしくは7位および8位で二置換され得る。さらに、6,7,8-トリアルコキシ化合物、例えば6,7,8-トリメトキシ化合物も含むことができる。有利なことに様々な他の置換基が、例えばグアニジニル、シクロアルキル、炭水化物残基(例えば、5個または6個の炭素の単糖類残基)、ペプチド残基、およびポリ(オキシアルキレン)連結基で環に連結した第四級アンモニウム塩、例えば $-(OCH_2CH_2)_x$   $-N^+R^1R^3R^4R^5A^-$  (式中、 $x$ は2~10)を含む、ベンゼン環の6位、7位、8位、および/または9位上に存在する。

#### 【0130】

本発明の別の化合物において、 $R^5$  および  $R^6$  は独立して、水素および環状-炭素が置換または未置換のアリール、チオフエン(thiopene)、ピリジン、ピロール、チアゾール、イミダゾール、ピラゾール、ピリミジン、モルホリン、*N*-アルキルピラジニウム、*N*-アルキルピペリジニウム、*N*-アルキルモルホリニウム、またはフランであり、ここでこれらの置換基は、例えばハロ、ヒドロキシル、トリハロアルキル、アルコキシ、アミノ、*N*-アルキルアミノ、*N,N*-ジアルキルアミノ、第四級アンモニウム塩、それが置換された第四級アンモニウム塩を有する $C_1-C_4$



アルキレン橋、アルコシカルボニル、アリールオシカルボニル、アルキルカルボニルオキシおよびアリールカルボニルオキシ、(0,0)-ジオキシアルキレン、 $-[O(CH_2)_d]_eX$ (式中、 $e$ は2~12であり、 $d$ は2または3であり、および $x$ はハロまたは第四級アンモニウム塩である。)、チオフエン、ピリジン、ピロール、チアゾール、イミダゾール、ピラゾール、またはフランから選択することができる。 $R^5$ または $R^6$ のアリール基は、好ましくはフェニル、フェニレンまたはベンゼントリイルであり、すなわち未置換、一置換または二置換であることができる。

### 【0131】

$R^5$  または  $R^6$  のアリール環上の置換基を構成している種には、フッ素、塩素、臭素、メトキシ、エトキシ、イソプロポキシ、トリメチルアンモニウム(好ましくはヨウ素または塩素対イオン)、メトシカルボニル、エトシカルボニル、ホルミル、アセチル、プロパノイル、(N)-ヘキシルジメチルアンモニウム、ヘキレントリメチルアンモニウム、トリ(オキシエチレン)ヨージド、およびテトラ(オキシエチレン)トリメチルアンモニウムヨージドがあり、各々、アリール環のp位置、m位置、または両方で置換されている。フェニルレン、ベンゼントリイルまたは他の芳香環上に位置する他の置換基は、3,4-ジオキシメチレン(5-員環)および3,4-ジオキシエチレン(6-員環)を含む。ある対象となる化合物の基は、 $R^5$  または  $R^6$  が、フェニル、p-フルオロフェニル、m-フルオロフェニル、p-ヒドロキシフェニル、m-ヒドロキシフェニル、p-メトキシフェニル、m-メトキシフェニル、p-N,N-ジメチルアミノフェニル、m-N,N-ジメチルアミノフェニル、 $l^-$  p-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-N<sup>+</sup>-フェニル、 $l^-$  m-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-N<sup>+</sup>-フェニル、 $l^-$  m-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-N<sup>+</sup>-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-フェニル、 $l^-$  p-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-N<sup>+</sup>-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-フェニル、 $l^-$  m-(N,N-ジメチルピペラジニウム)-(N')-CH<sub>2</sub>-(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-フェニル、3-メトキシ-4-フルオロフェニル、チエニル-2-イル、5-クロロチエニル-2-イル、3,4-ジフルオロフェニル、 $l^-$  p-(N,N-ジメチルピペラジニウム)-(N')-CH<sub>2</sub>-(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-フェニル、3-フルオロ-4-メトキシフェニル、4-ピリジニル、2-ピリジニル、3-ピリジニル、N-メチル-4-ピリジニウム、 $l^-$  N-メチル-3-ピリジニウム、3,4-ジオキシメチレンフェニル、3,4-ジオキシエチレンフェニル、およびp-メトシカルボニルフェニルから選択されるようなものである。

## 【0132】

好ましい化合物は、各々下記表1、2および3に示したR<sup>x</sup>置換基と組合せて前述の好ましいR<sup>5</sup>置換基を有する3-エチル-3-ブチルおよび3-ブチル-3-ブチル化合物である。特に好ましいR<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>の一方は水素であるが、両方ではない。

## 【0133】

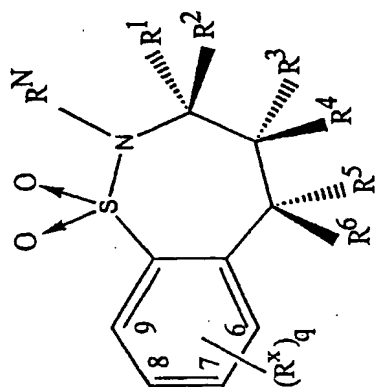
特に好ましいR<sup>4</sup>およびR<sup>6</sup>は水素であり、R<sup>3</sup>およびR<sup>5</sup>は水素でなく、かつR<sup>3</sup>およびR<sup>5</sup>は、分子面に対して同方向に配向しており、すなわち両方が $\alpha$ -または $\beta$ -立体配置にある。更に好ましくは、R<sup>2</sup>はブチルであり、およびR<sup>1</sup>はエチルであり、その結果R<sup>1</sup>はR<sup>3</sup>およびR<sup>5</sup>のように、分子面に対して同方向に配向している。

## 【0134】

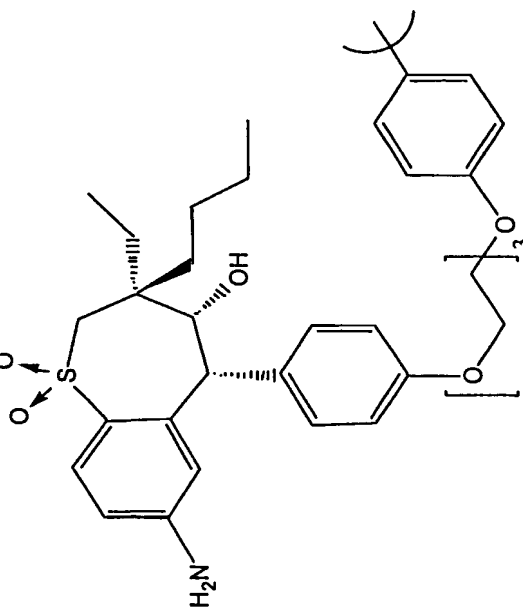
特に対象となる他のクラスの化合物は、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>およびR<sup>5</sup>ラジカルが下記表1に示された1,2-ベンゾチアゼピンを含み；R<sup>6</sup>ラジカルが水素であり；R<sup>n</sup>ラジカルが水素、メチル、エチル、n-プロピル、n-ブチル、n-ペンチル、n-ヘキシルおよびベンジルからなる群より選択され；かつ、1個または複数のR<sup>x</sup>ラジカルがそれぞれ独立して下記表1に記されたR<sup>x</sup>ラジカルより選択される。表1の第一の部分は、各化合物のR<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>およびR<sup>5</sup>ラジカルを確定し、かつ表1の第二の部分はそれらの化合物について1個または複数のR<sup>x</sup>ラジカルを確定している。

## 【0135】

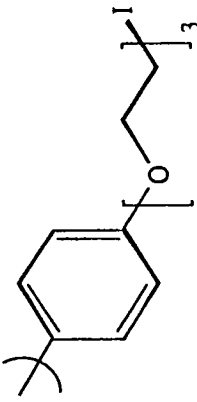
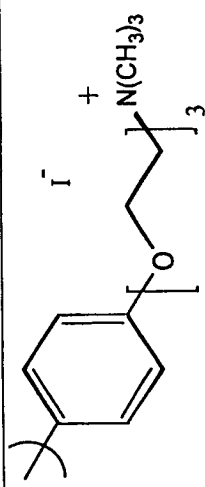
## 【表1】

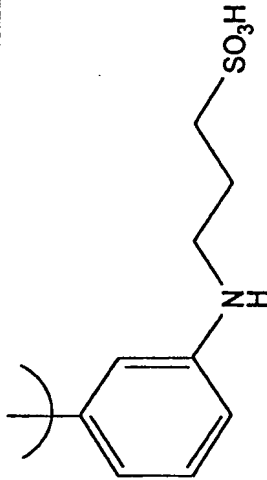
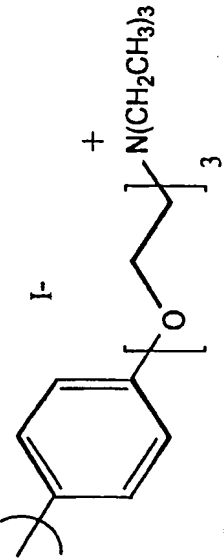
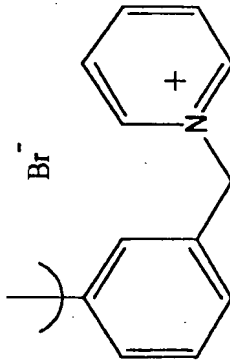
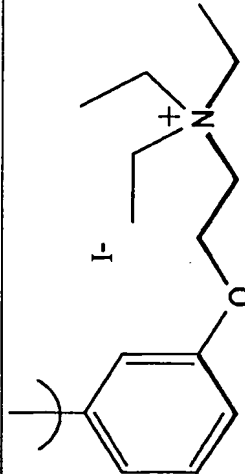


化合物番号	R1	R2	R3	R4	R5
101	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
102	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
103	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
104	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
105	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
106	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
107	n-ブチル	エチル	OH	H	4-デシルオキシシルフェニル
108	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
109	エチル	n-ブチル	OH	H	4-デシルオキシシルフェニル

110	エチル	フェニル	OH	H	フェニル
111	フェニル	エチル	OH	H	4-ヒドロキシルフェニル
112	エチル	フェニル	OH	H	
					
113	エチル	n-ブチル	OH	H	4-ヒドロキシルフェニル
114	エチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
115	n-ブチル	エチル	OH	H	4-メトキシフェニル
116	エチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
117	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
118	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
119	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
120	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
121	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
122	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
123	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル

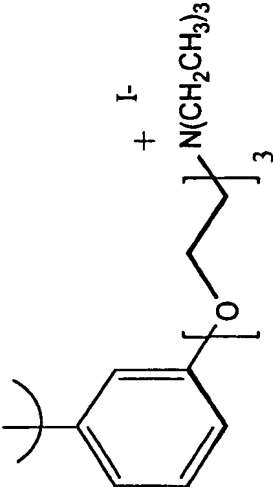
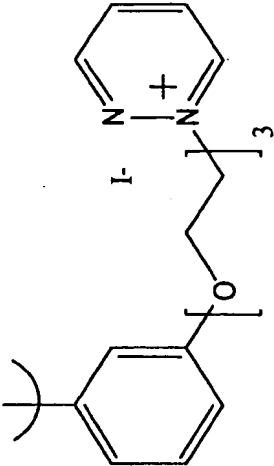
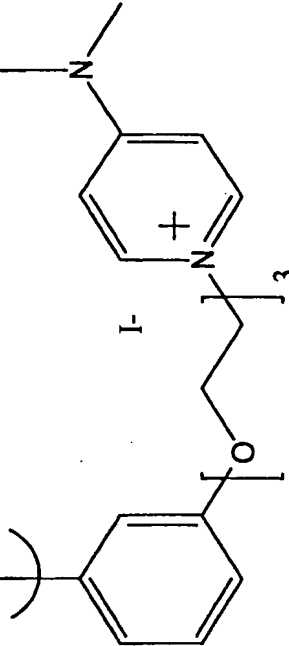
124	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
125	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
126	n-ブチル	エチル	OH	H	4-フルオロフェニル
127	n-ブチル	エチル	OH	H	4-フルオロフェニル
128	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
129	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
131	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
132	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
133	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
134	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
135	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
136	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
137	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
138	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
139	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
142	エチル	n-ブチル	H	OH	H
143	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
144	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
262	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
263	エチル	n-ブチル	H	OH	H
264	エチル	n-ブチル	OH	H	3-トリフルオロメチルフェニル
265	エチル	n-ブチル	H	OH	H
266	エチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシフェニル
267	エチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシフェニル
268	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
269	エチル	n-ブチル	H	OH	H
270	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
271	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
272	エチル	n-ブチル	H	OH	H
273	エチル	n-ブチル	H	OH	H
274	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
275	エチル	n-ブチル	H	OH	H
276	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル

277	エチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロフェニル
278	エチル	n-ブチル	H	OH	2-フルオロフェニル
279	エチル	n-ブチル	H	OH	3-フルオロフェニル
280	エチル	n-ブチル	OH	H	2-フルオロフェニル
281	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
282	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
283	エチル	n-ブチル	H	OH	H
284	エチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
286	エチル	エチル	OH	H	フェニル
287	エチル	エチル	OH	H	フェニル
288	メチル	メチル	OH	H	フェニル
289	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
290	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
291	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
292	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
293	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
294	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
295	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
					
296	エチル	n-ブチル	OH	H	

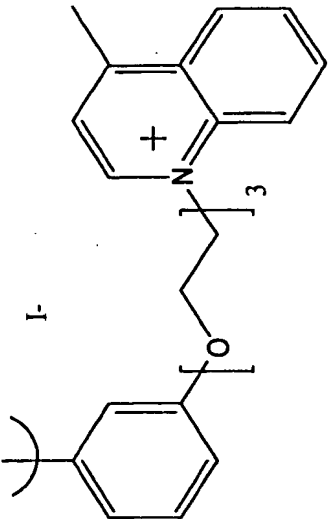
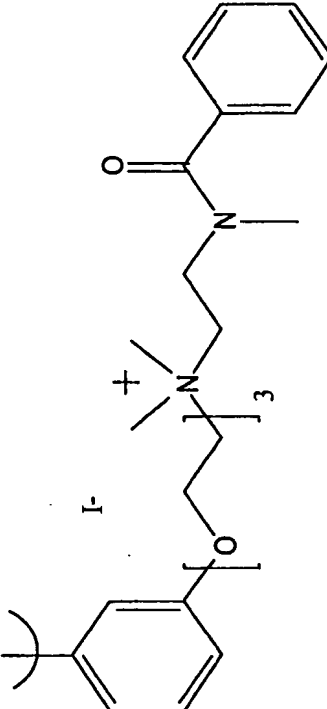
1000	エチル	n-ブチル	OH	H	
1001	エチル	n-ブチル	OH	H	
1002	エチル	n-ブチル	OH	H	
1003	エチル	n-ブチル	OH	H	

1004	エチル	n-ブチル	OH	H	
1005	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1006	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	



1007	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 $\text{[Ph-O-CH}_2\text{CH}_2\text{N(CH}_2\text{CH}_3)_3\text{]}_3 \text{I}^-$
1008	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 $\text{[Ph-O-CH}_2\text{CH}_2\text{N}^+\text{(CH}_2\text{CH}_3)_3\text{Py}^-]_3 \text{I}^-$
1009	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 $\text{[Ph-O-CH}_2\text{CH}_2\text{N}^+\text{(CH}_3)_2\text{Py}^-]_3 \text{I}^-$
1010	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-(5-トリメチルアンモニウムベンチルオキシ)フェニル
1011	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フルオロ酢酸塩
1012	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ヒドロキシフェニル

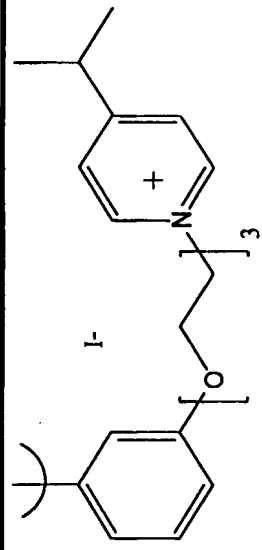
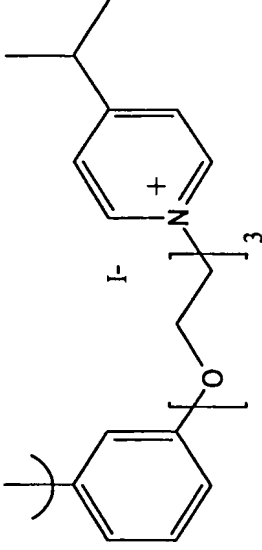
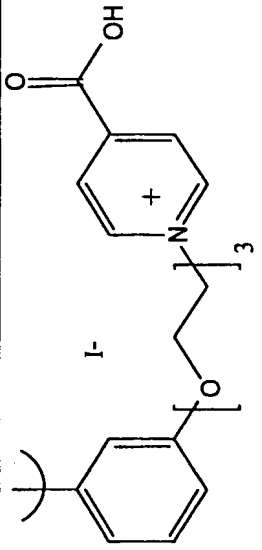
1013	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	<p>4-メトキシフェニル</p>
1014	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1015	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1016	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1017	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1018	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1019	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1020	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1021	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

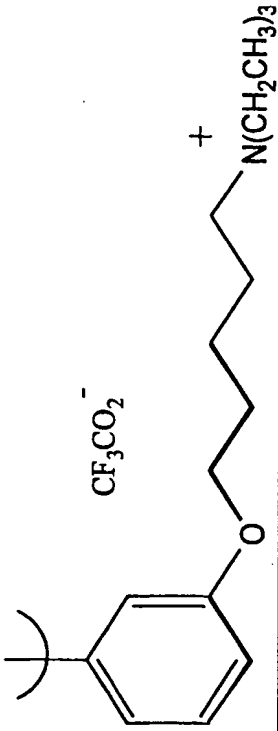
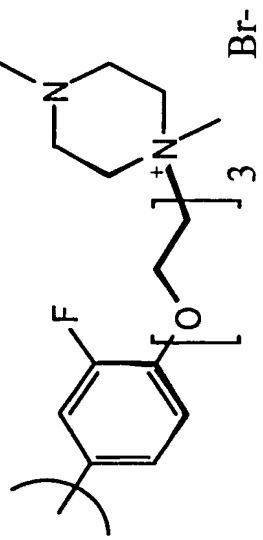
1022	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1023	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

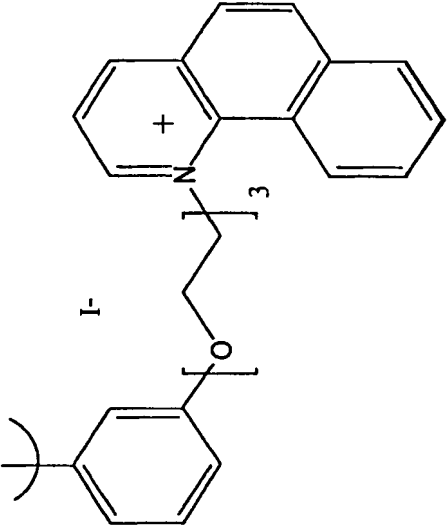
1024	n-ブチル	n-ブチル	H	
1025	n-ブチル	n-ブチル	H	

1026	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1027	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1028	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

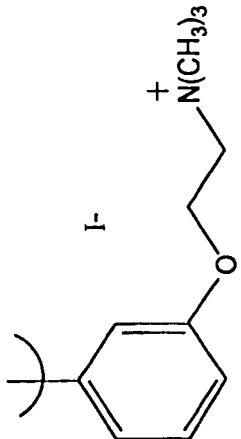
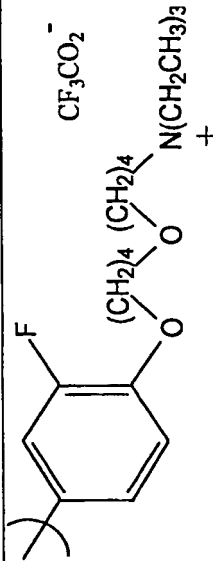
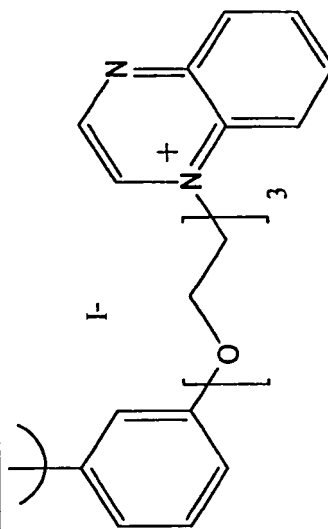
1029	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1030	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1031	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	



1032	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1033	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

	H	OH	n-ブチル	n-ブチル	1034
--	---	----	-------	-------	------

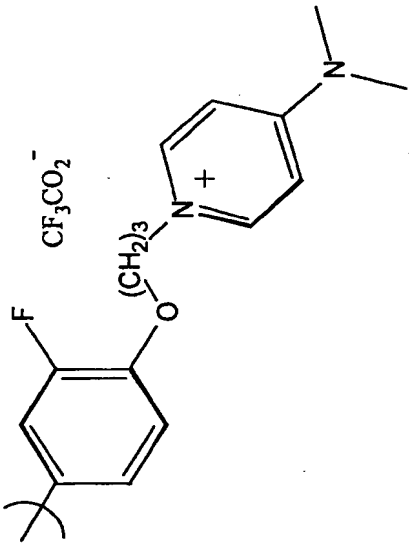
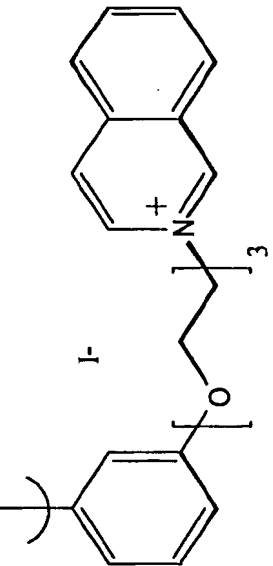
1035	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1036	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1037	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1038	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1039	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1040	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1041	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1042	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	$\text{I}^-$ $\text{N}(\text{C}_6\text{H}_5)_3^+$
1043	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1044	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	$\text{CF}_3\text{CO}_2^-$ $\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_3^+$
1045	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	$\text{CF}_3\text{CO}_2^-$ $\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_3^+$
1046	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-アミノフェニル

1047	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1048	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1049	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1050	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1051	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1052	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

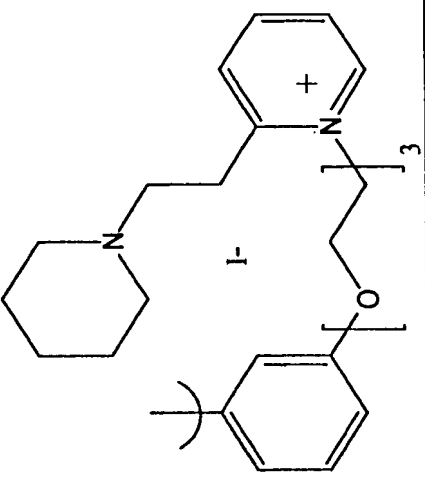
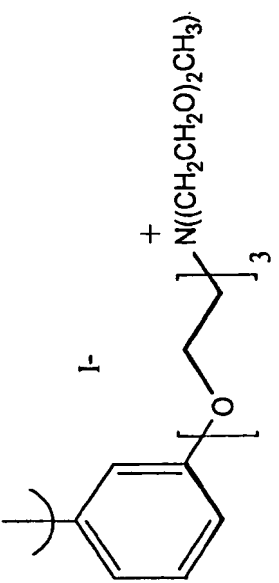
1053	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1054	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

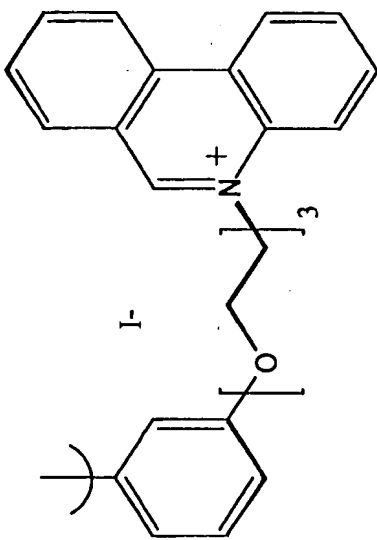
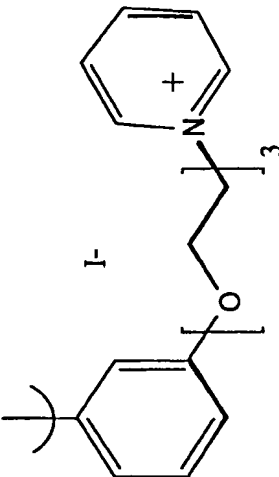
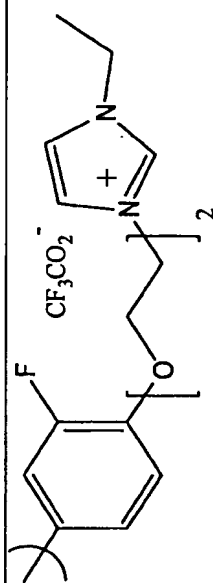


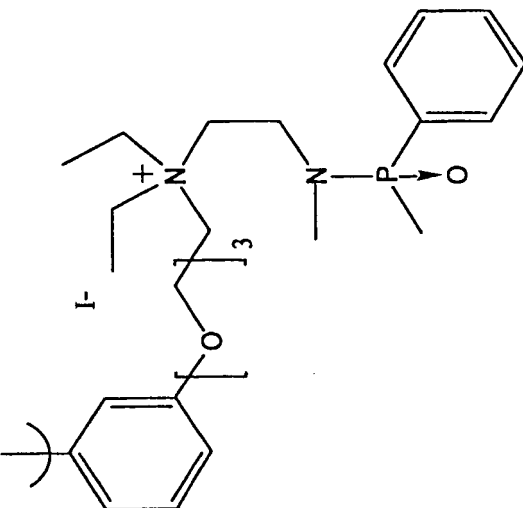
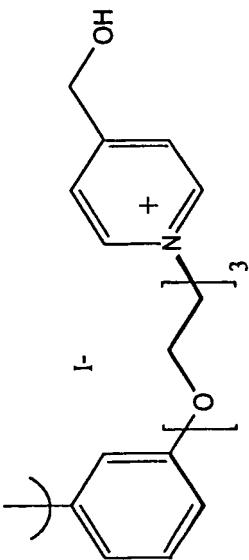
1055	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1056	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1057	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1058	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1059	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1060	エチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1061	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1062	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1063	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1064	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1065	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1066	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1067	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	チオフェン-3-イル
1068	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1069	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1070	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

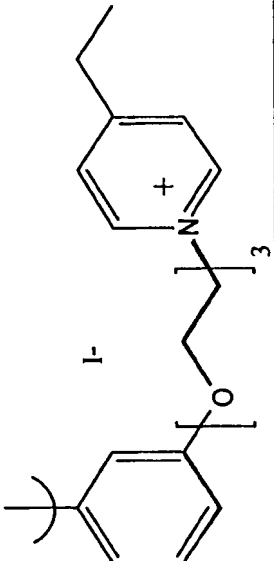
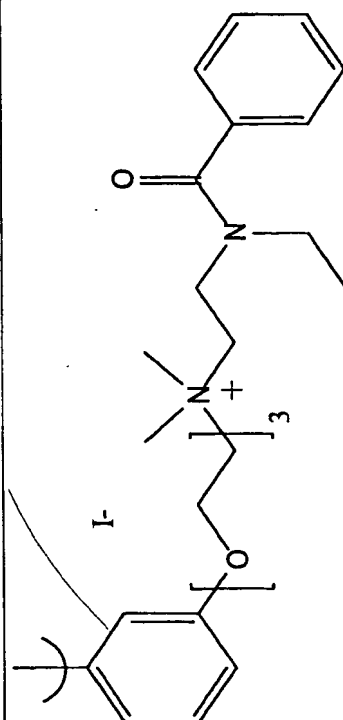
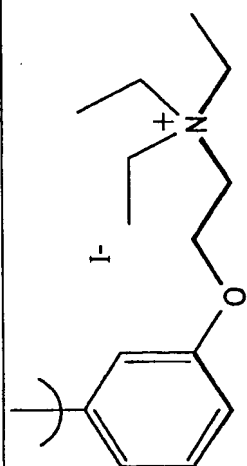
1071	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1072	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

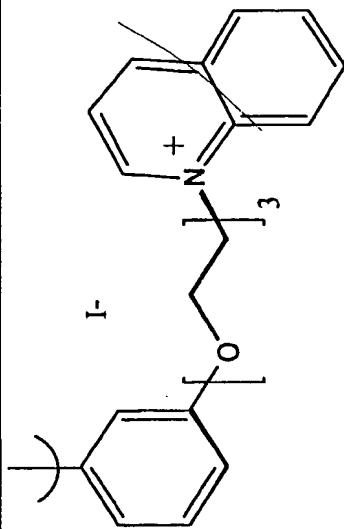
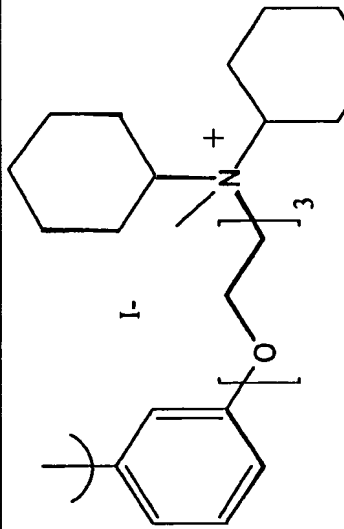
— 195 —

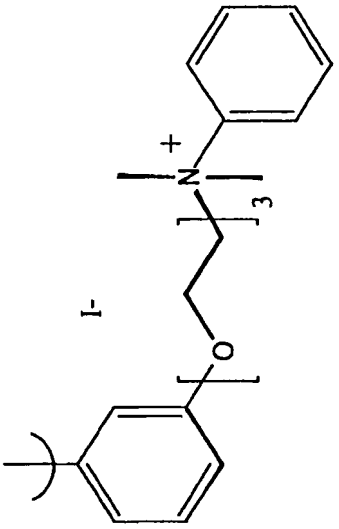
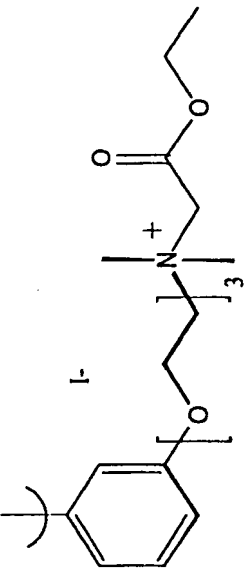
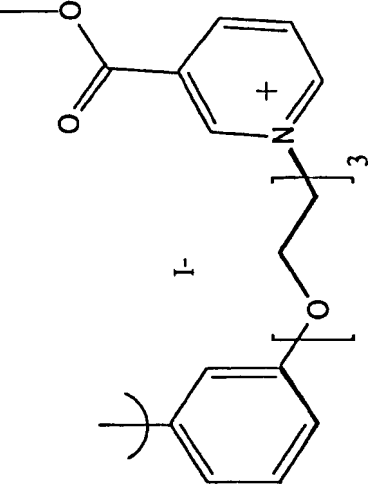
1079	エチル	n-ブチル	OH	H	
------	-----	-------	----	---	--



1080	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1081	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1082	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	2-ピリジル
1083	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1084	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1085	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	チオフェン-3-イル
1086	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1087	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1088	エチル	n-ブチル	OH	H	3, 4-メチレンジオキシフェニル
1089	エチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル

1090	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1091	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1092	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1093	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1094	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1095	n-ブチル	n-ブチル	H	
1096	n-ブチル	n-ブチル	H	
1097	n-ブチル	n-ブチル	H	

1098	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1099	エチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1100	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1101	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1102	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-カルボキシメチルフェニル
1103	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

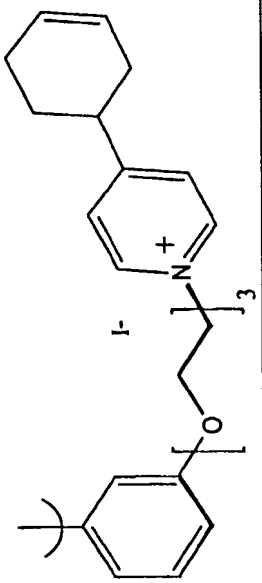
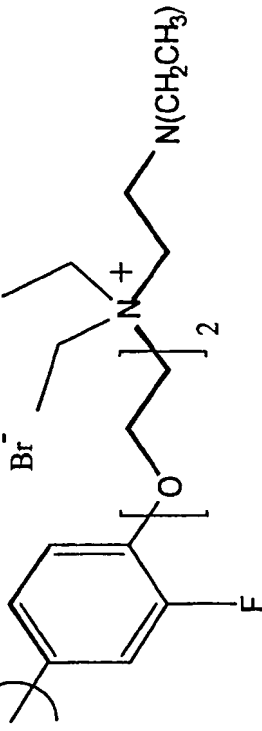
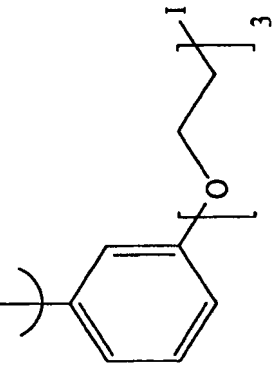
1104	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1105	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	5-ピペロニル
1106	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシフェニル
1107	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1108	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ピリジル
1109	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

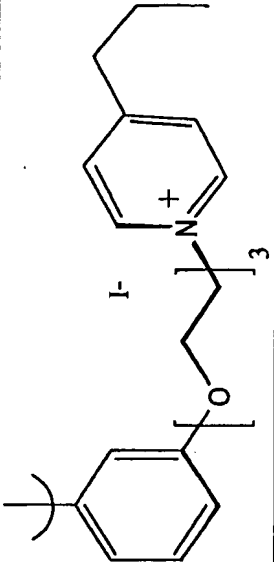
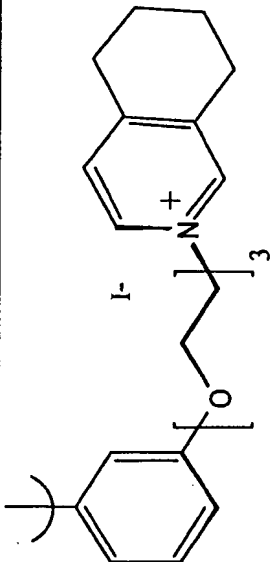
1110	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1111	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1112	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ピリジル
1113	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1114	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1115	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1116	エチル	n-ブチル	OH	H	3-トリル

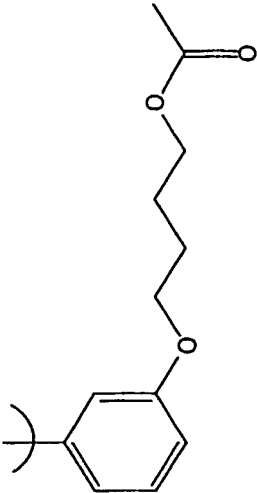
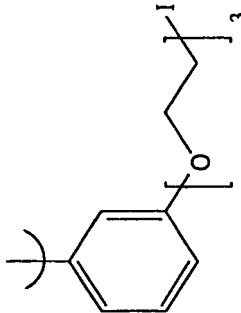
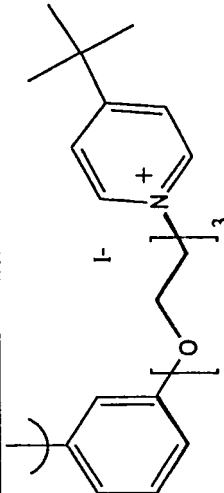


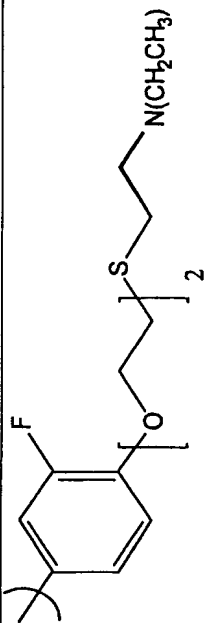
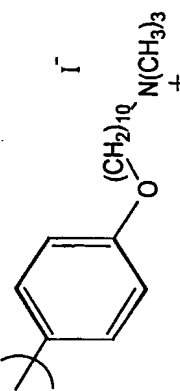
1117	エチル	n-ブチル	OH	H	
1118	エチル	n-ブチル	OH	H	
1119	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1120	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

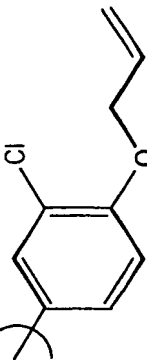
3-フルオロ-4-ヒドロキシルフェニル

1121	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1122	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1123	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1124	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1125	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-クロロ-4-メトキシフェニル
1126	エチル	n-ブチル	OH	H	

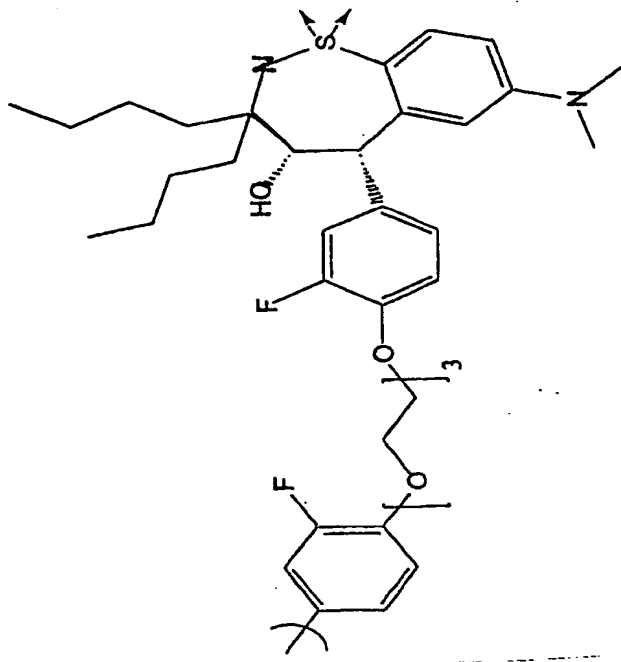
1127	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1128	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-ヒドロキシフェニル
1129	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1130	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-クロロ-4-フルオロフェニル
1131	エチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1132	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1133	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-シアノメチルフェニル

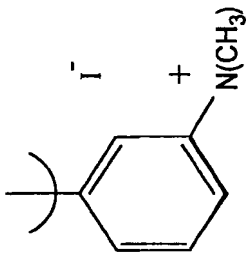
1134	エチル	n-ブチル	OH	H	
1135	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3,4-ジメトキシフェニル
1136	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1137	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1138	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1139	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3,4-ジフルオロフェニル
1140	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル

1141	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1142	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
					
1143	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	H
1144	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	5-ペンテニル
1145	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1146	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
					
1147	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1148	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1149	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1150	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1151	n-ブチル	エチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1152	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1153	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1154	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1155	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1156	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1157	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1158	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ピリジニル、塩酸塩
1159	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1160	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル

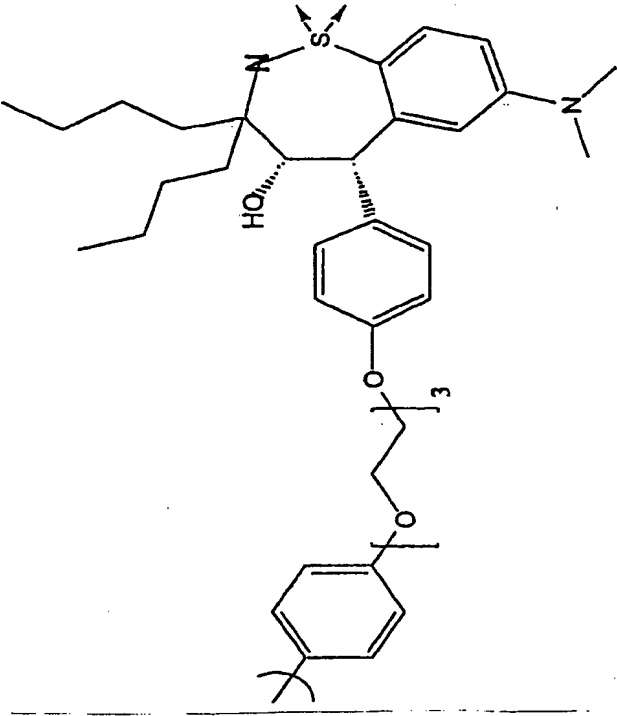
1161	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3, 5-ジクロロ-4-メトキシフェニル
1162	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1163	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-(ジメチルアミノ)フェニル
1164	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ピリジニル
1165	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1166	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシフェニル
1167	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1168	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ヒドロキシフェニル
1169	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1170	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1171	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)フェニル
1172	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ピリジニル
1173	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1174	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1175	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1176	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1177	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1178	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1179	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-(トリフルオロメチルスルホニルオキシ)フェニル
1180	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1181	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1182	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1183	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-(ジメチルアミノ)フェニル
1184	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1185	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1186	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1187	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1188	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
					4-メトキシフェニル

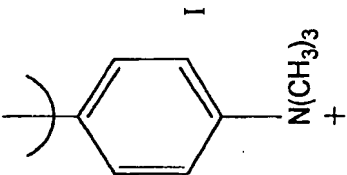
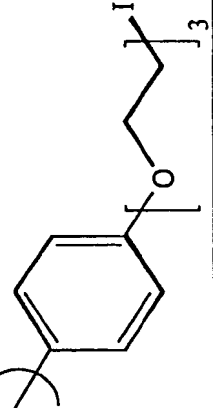
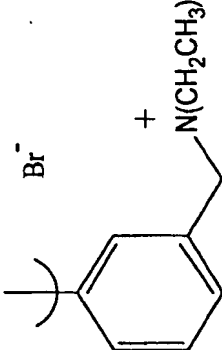
1189	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3, 4-ジフルオロフェニル
1190	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	2-プロモフェニル
1191	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-(ジメチルアミノ)フェニル
1192	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-(ジメチルアミノ)フェニル
1193	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-(2-(2-メチルプロピル)フェニル
1194	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1195	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル

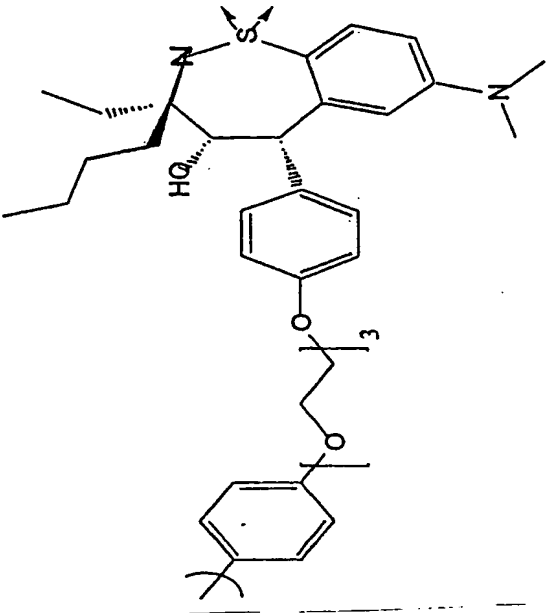


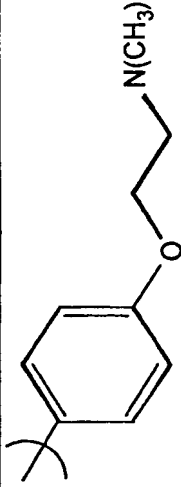
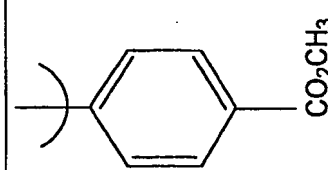
1196	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 フェニル 4- (ピリジニル-N-オキシド)
1197	n-ブチル	エチル	R3 + R4 = oxo	R3 + R4 = oxo H	
1198	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

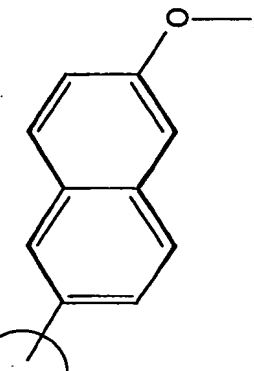
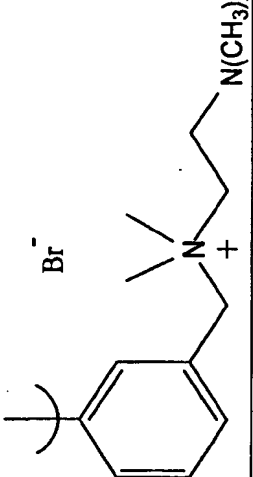
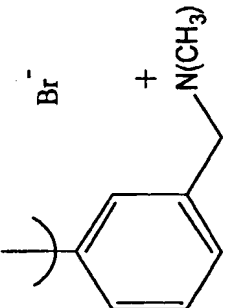


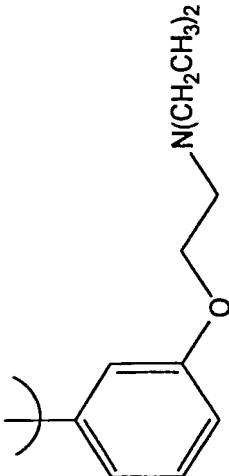
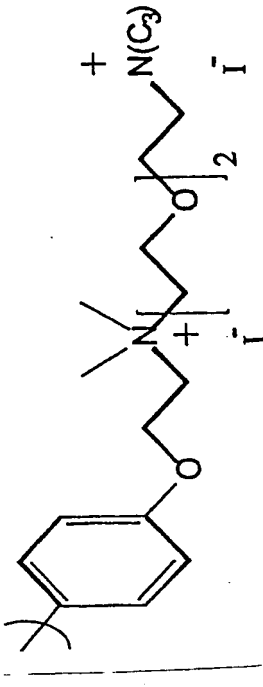
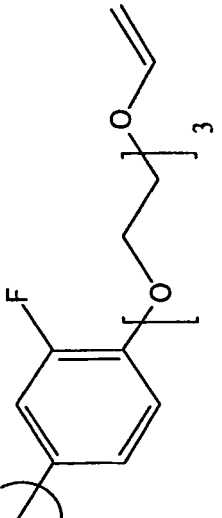
1199	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1200	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	
1201	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

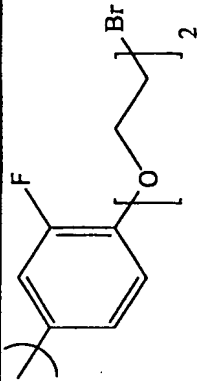
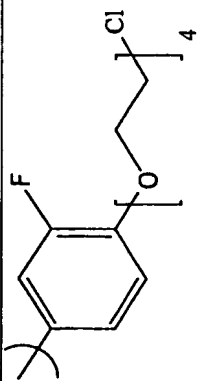
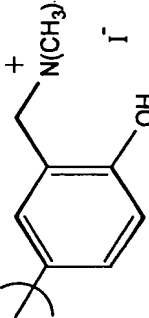
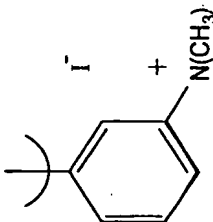
1202	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1203	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	5-ビベラジニル
1204	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1205	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1206	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1207	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3, 5-ジクロロフェニル
1208	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1209	n-ブチル	n-ブチル	アセトキシ	H	フェニル
1210	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	2- (ジメチルアミノ) フェニル

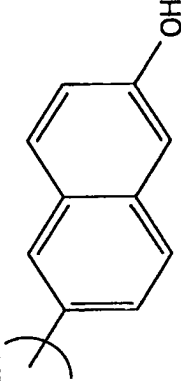
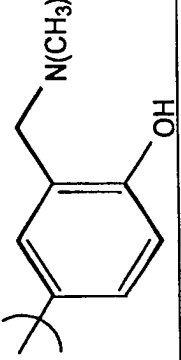
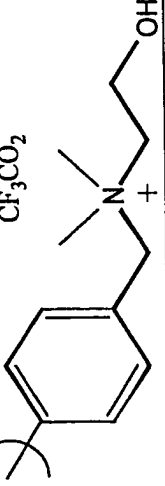
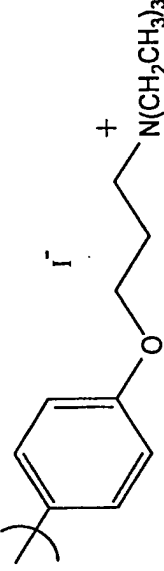
1211	エチル	n-ブチル	OH	H	
1212	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1213	n-ブチル	エチル	H	OH	
1214	n-ブチル	エチル	OH	H	
1215	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1216	エチル	n-ブチル	OH	H	
1217	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1218	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1219	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1220	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1221	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1222	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1223	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1224	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ニトロフェニル
1225	n-ブチル	エチル	OH	H	3-メチルフェニル
1226	エチル	n-ブチル	OH	H	5-ピペロニル
1227	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1228	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	2-ピロリル
1229	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-クロロ-4-ヒドロキシフェニル
1230	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル

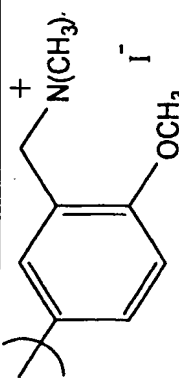
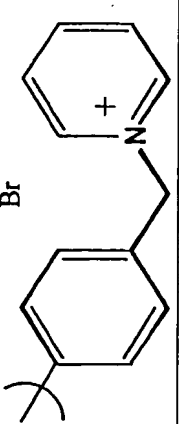
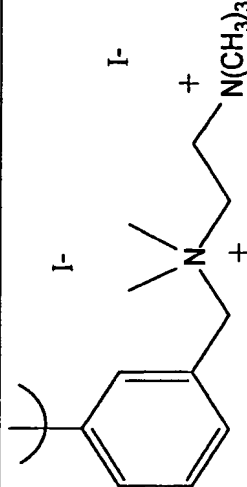
1231	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1232	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	3-チオフェニル
1233	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1234	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

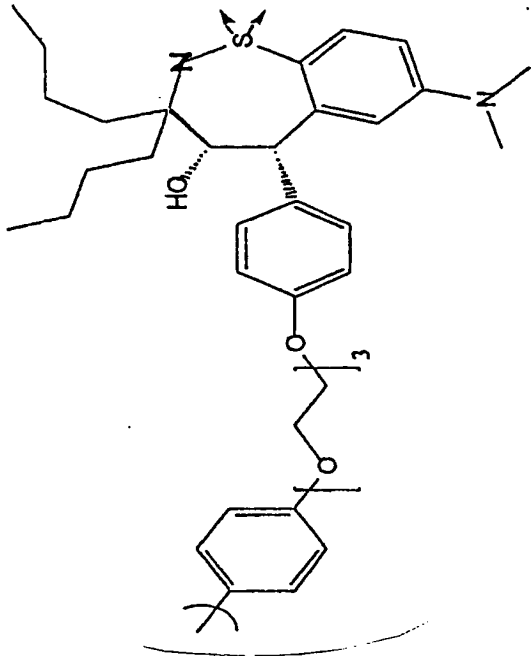
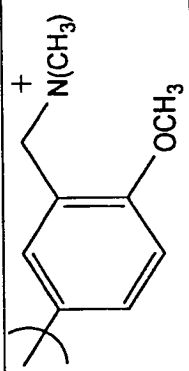
1235	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1236	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-(プロキメチル) フェニル
1237	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1238	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

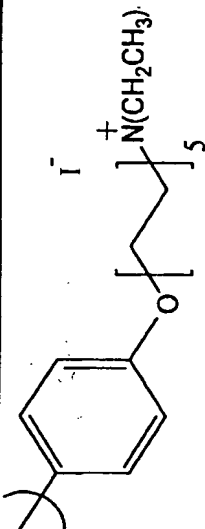
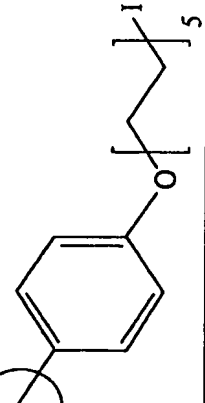
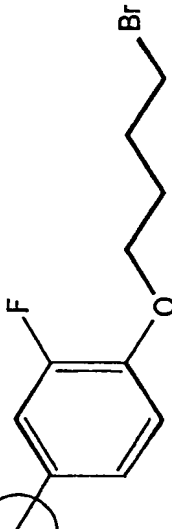
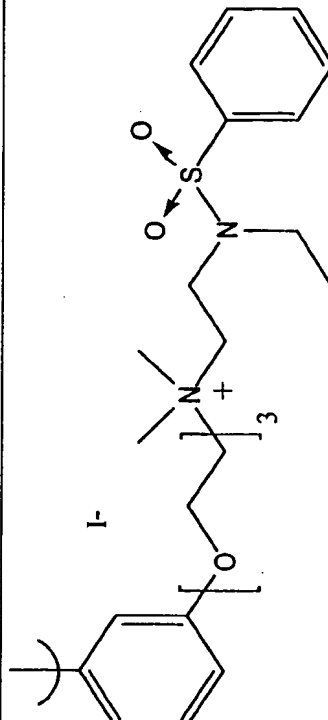
1239	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1240	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシ-3-メチルフェニル
1241	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-(ジメチルアミノメチル)フェニル
1242	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1243	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1244	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1245	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

						3-(プロモメチル)フェニル
1246	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1247	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1248	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1249	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1250	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-(ジメチルアミノ)フェニル
1251	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	1-ナフチル
1252	n-ブチル	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	



1253	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1254	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1255	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1256	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ニトロフェニル
1257	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1258	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1259	エチル	n-ブチル	H	OH	H
1260	エチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシルフェニル

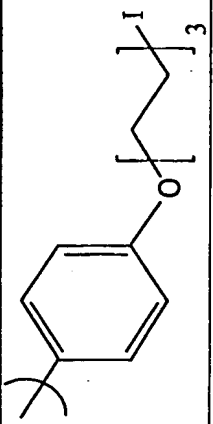
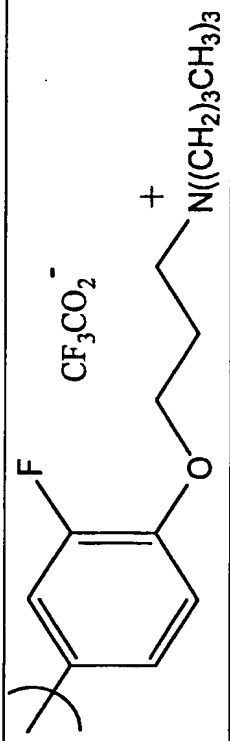
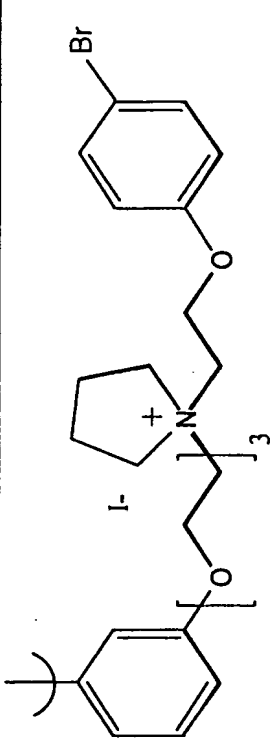
1261	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1262	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	2-チオフェニル
1263	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	5-ピペロニル
1264	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1265	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1266	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1267	n-ブチル	エチル	OH	H	5-ピペロニル

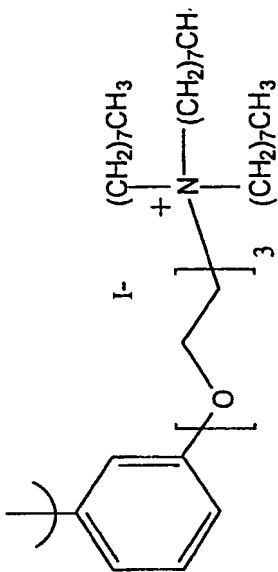
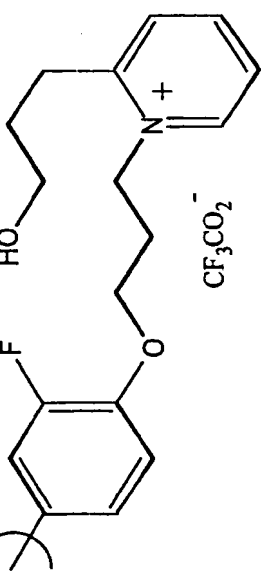
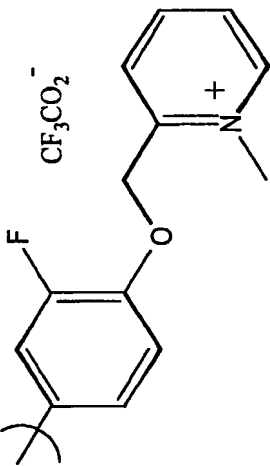
1268	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1269	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1270	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1271	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1272	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1273	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1274	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

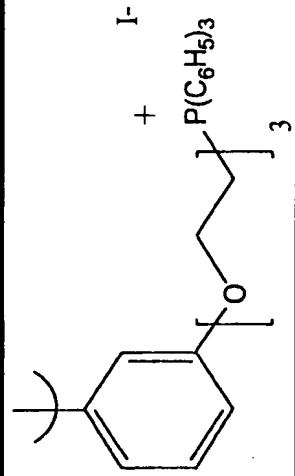
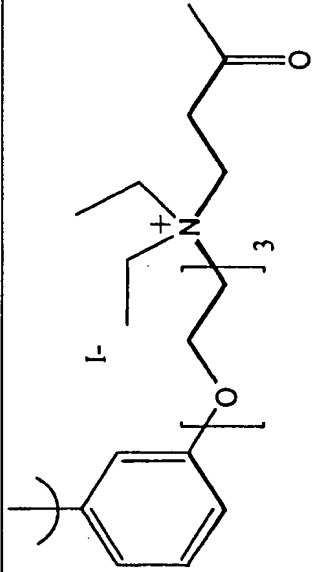
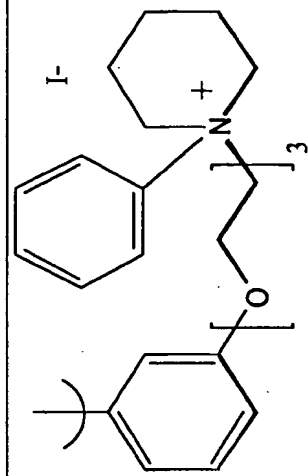
1275	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1276	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1277	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1278	n-ブチル	n-ブチル	H	
1279	n-ブチル	n-ブチル	H	
1280	n-ブチル	n-ブチル	H	

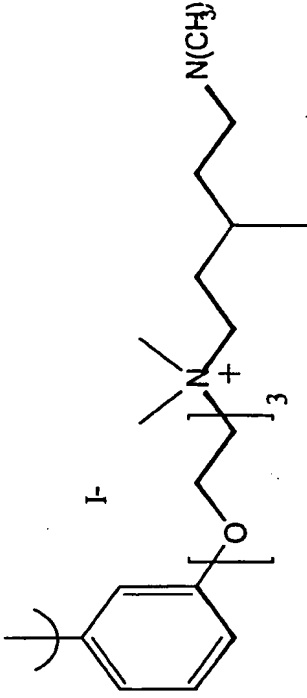
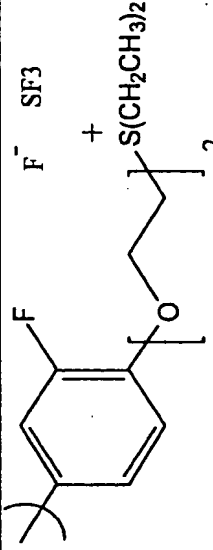
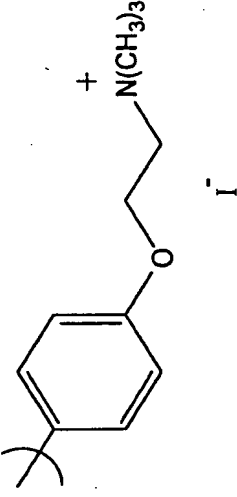
1281	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1282	エチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1283	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-ヒドロキシメチルフェニル
1284	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル
1285	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1286	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1287	n-ブチル	エチル	OH	H	4-ヒドロキシフェニル
1288	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1289	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polyether polymer. It consists of a p-phenylene ring connected to a polyether chain. The chain ends with a quaternary ammonium salt group: <math>\text{I}^-</math> and <math>\text{N}^+(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3</math>.</p>
1290	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polymer. It consists of a p-phenylene ring connected to a polyether chain. The chain ends with a quaternary ammonium salt group: <math>\text{CF}_3\text{CO}_2^-</math> and <math>\text{N}^+(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3</math>.</p>
1291	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polymer. It consists of a p-phenylene ring connected to a polyether chain. The chain ends with a quaternary ammonium salt group: <math>\text{CF}_3\text{CO}_2^-</math> and <math>\text{N}^+(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3</math>.</p>

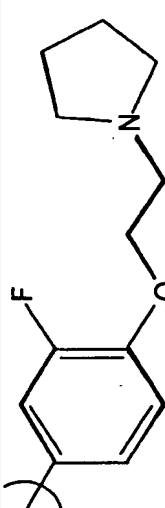
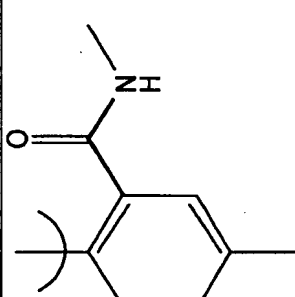
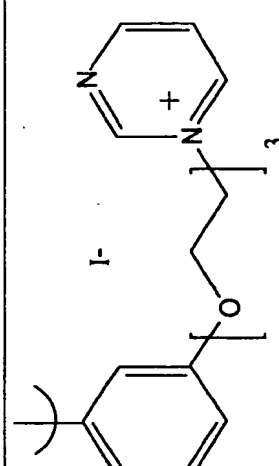


1292	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1293	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1294	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

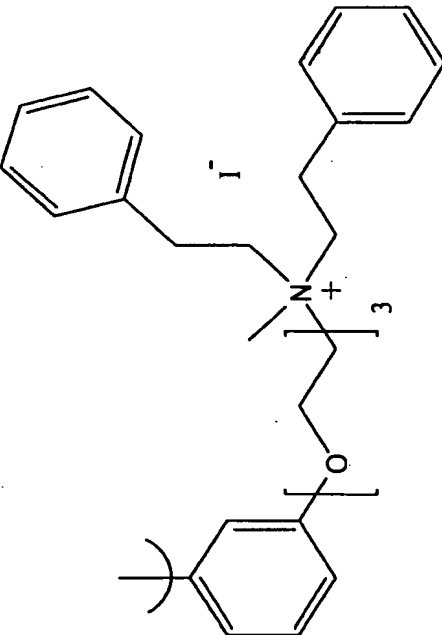
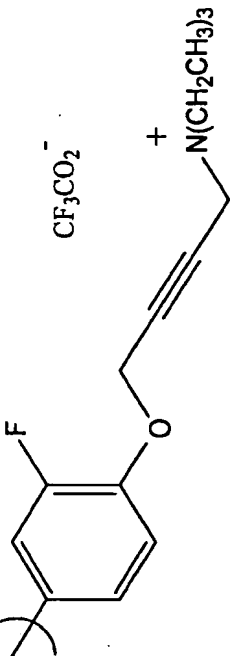
1295	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1296	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1297	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

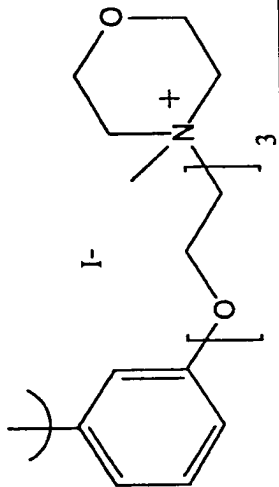
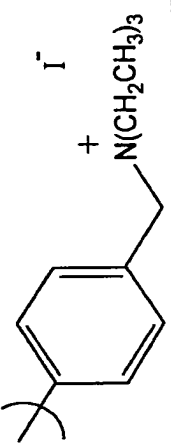
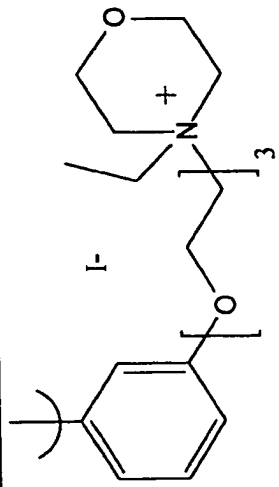
1298	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1299	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1300	n-ブチル	エチル	H	OH	H
1301	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1302	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-ヒドロキシフェニル
1303	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1304	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1305	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-フルオロフェニル

1306	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1307	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1308	エチル	n-ブチル	OH	H	
1309	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル
1310	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1311	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1312	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1313	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1314	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1315	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1316	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1317	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル

1318	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1319	エチル	n-ブチル	OH	H	3-メトキシフェニル
1320	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1321	n-ブチル	エチル	OH	H	フェニル
1322	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
					
1323	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
					
1324	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
					
1325	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-((ジエチルアミノ)メチル)フェニル

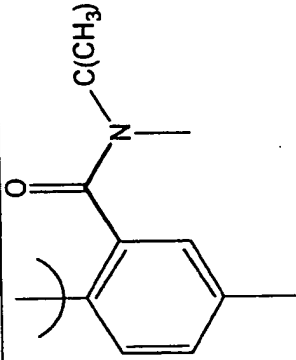
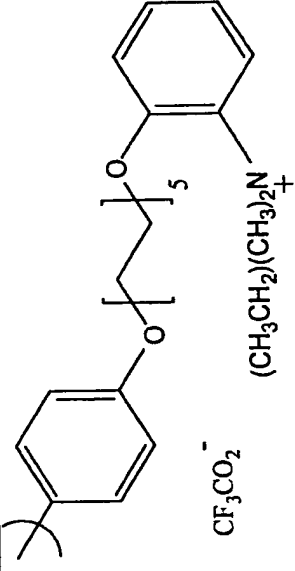
1326	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
3-フルオロ-4-ヒドロキシ-5-ヨードフェニル					
1327	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1328	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1329	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

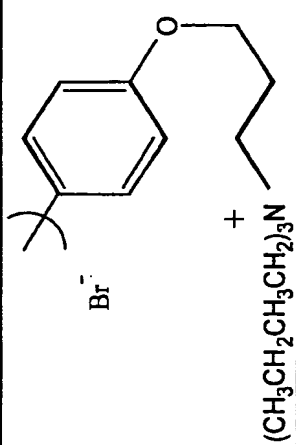
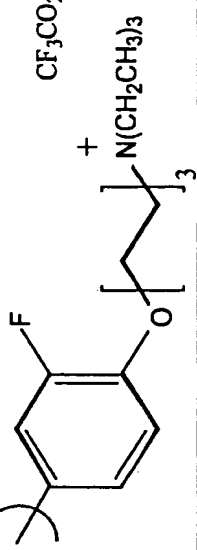
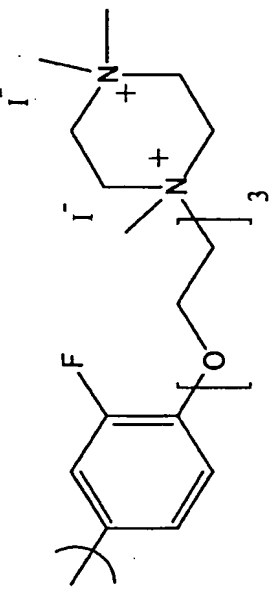
1330	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1331	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1332	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polyether polymer. The repeating unit consists of a p-phenylene ring connected to an ether linkage, which is further connected to a trimethylammonium salt side chain. The side chain is represented as <math>[-CH_2CH_2O-]_3</math> with a <math>N^+(CH_3)_3</math> group and an <math>I^-</math> counterion.</p>
1333	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polyether polymer. The repeating unit consists of a p-phenylene ring connected to an ether linkage, which is further connected to a trimethylammonium salt side chain. The side chain is represented as <math>[-CH_2CH_2O-]_3</math> with a <math>N^+(CH_3)_3</math> group and an <math>I^-</math> counterion.</p>
1334	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p>Chemical structure of a polyether polymer. The repeating unit consists of a p-phenylene ring connected to an ether linkage, which is further connected to a trimethylammonium salt side chain. The side chain is represented as <math>[-CH_2CH_2O-]_3</math> with a <math>N^+(CH_3)_3</math> group and an <math>I^-</math> counterion.</p>



1335	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1336	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1337	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1338	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	4-メトキシフェニル

1339	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1340	n-ブチル	エチル	OH	H	5-ピペロニル
1341	n-ブチル	n-ブチル	アセトキシ	H	3-メトキシフェニル
1342	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	5-ピペロニル
1343	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1344	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1345	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1346	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1347	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1348	イソブチル	イソブチル	OH	H	フェニル
1349	エチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1350	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	3-フルオロ-4-メトキシフェニル
1351	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1352	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p> <math>\text{Br}^-</math>  <math>(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}^+</math>  <math>\text{CF}_3\text{CO}_2</math> </p>
1353	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p> <math>\text{CF}_3\text{CO}_2</math>  <math>\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_3</math> </p>
1354	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 <p> <math>\text{I}^-</math>  <math>\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_3</math> </p>

1355	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1356	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1357	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

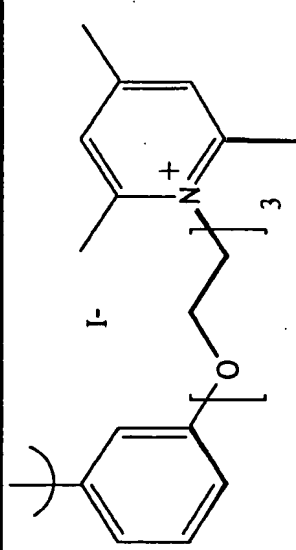
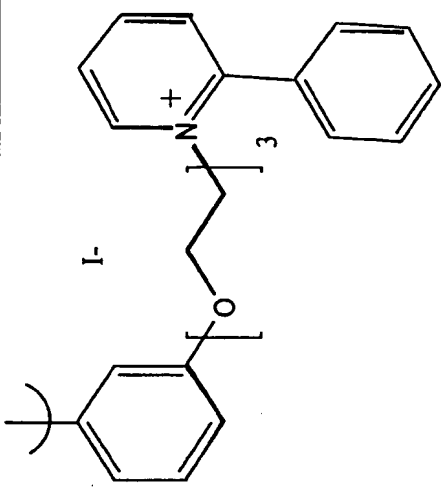
1358	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1359	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

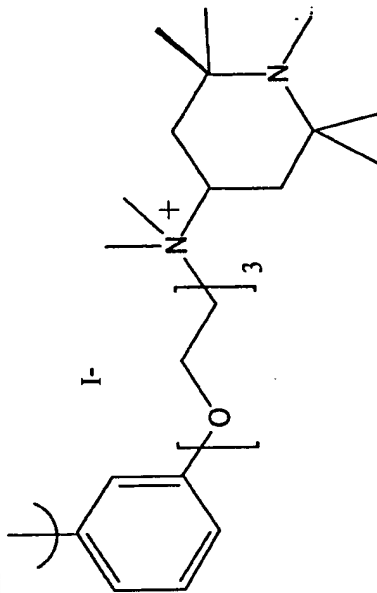
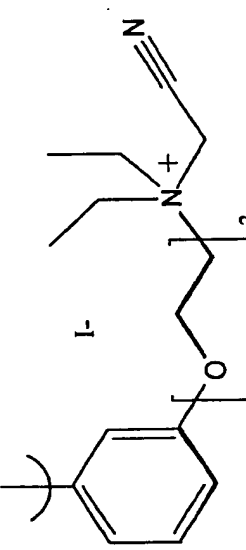
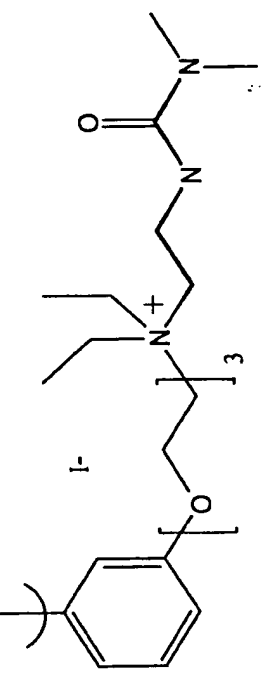
1360	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1361	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1362	n-ブチル	n-ブチル	H	
1363	n-ブチル	n-ブチル	H	
1364	n-ブチル	n-ブチル	H	

1365	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1366	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1367	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

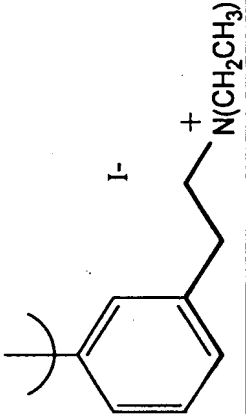
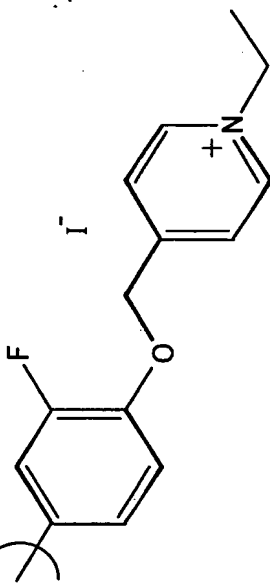
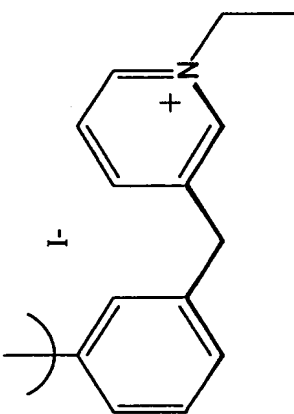


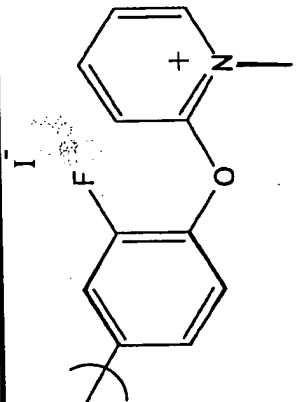
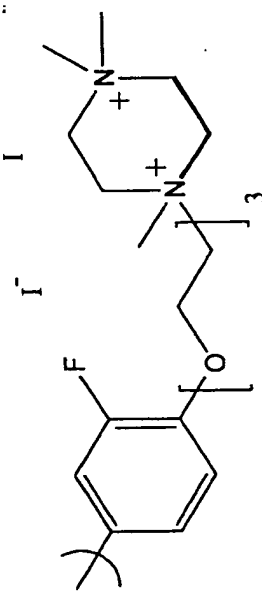
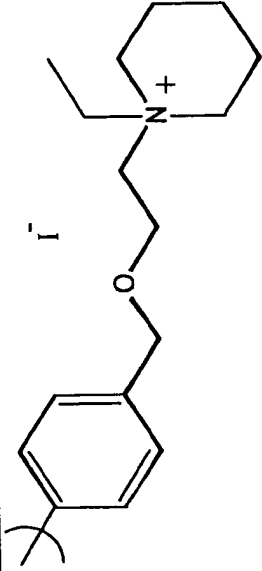
1368	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1369	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

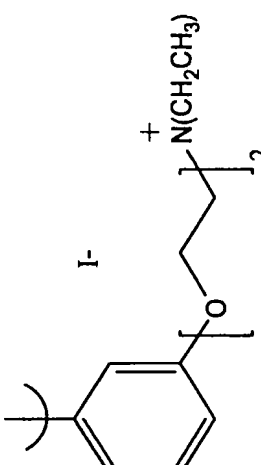
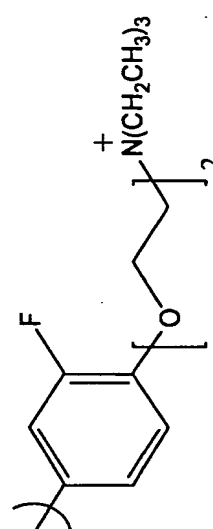
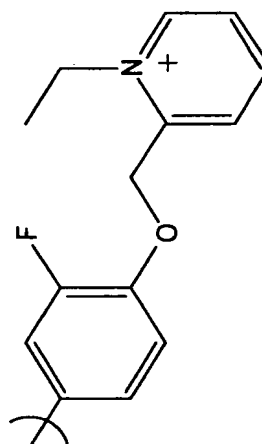
1370	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1371	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1372	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

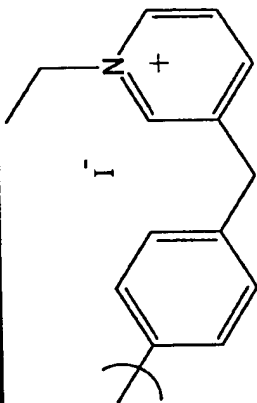
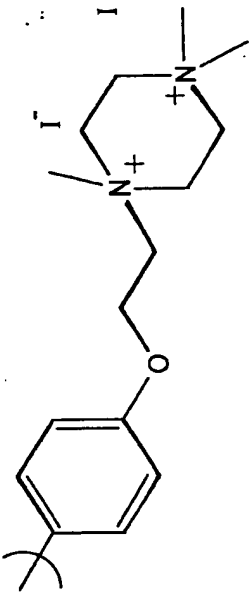
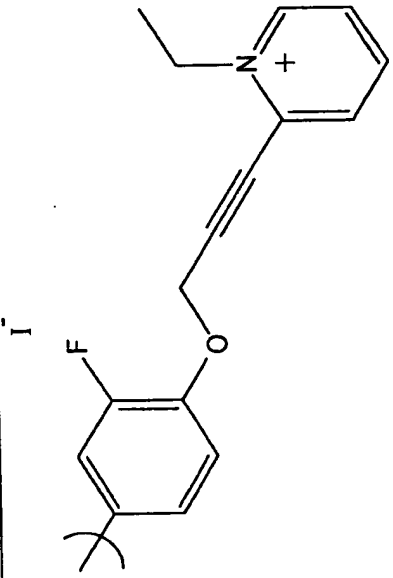
1373	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1374	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1375	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1376	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1377	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1378	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1379	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1380	n-ブチル	n-ブチル	H	
1381	n-ブチル	n-ブチル	H	
1382	n-ブチル	n-ブチル	H	

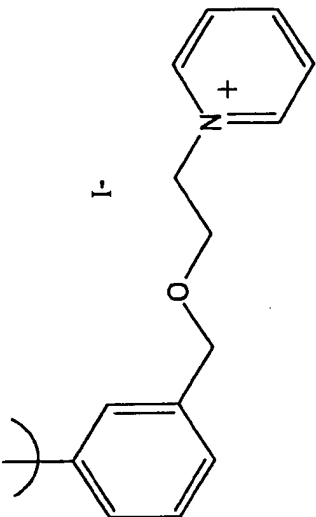
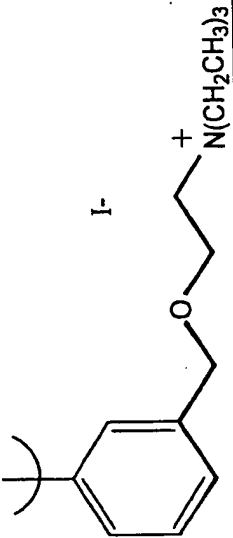
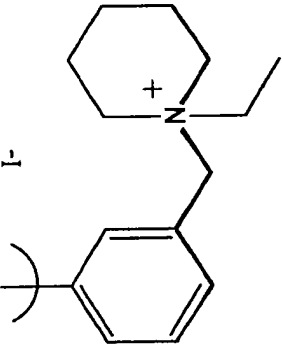
1383	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1384	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1385	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1386	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1387	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1388	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1389	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1390	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1391	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

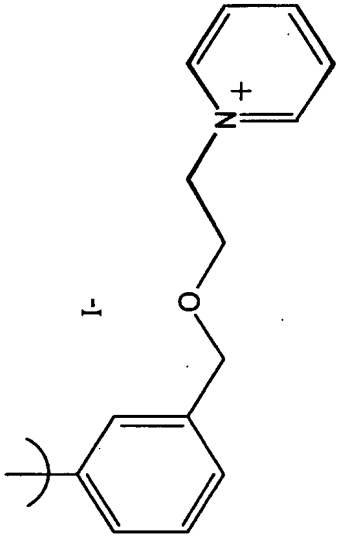
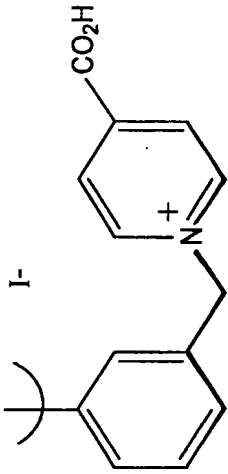
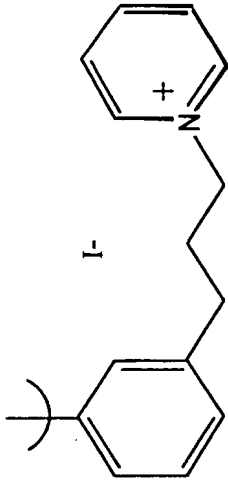


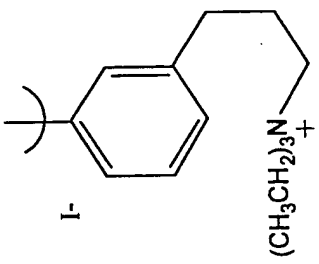
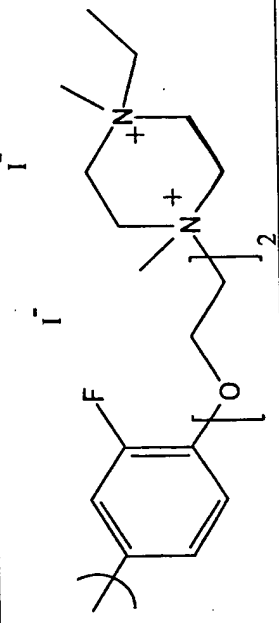
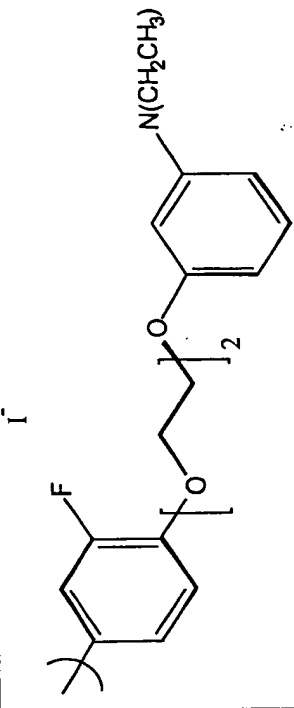
1392	n-ブチル	n-ブチル	H	<p>Chemical structure of a polymer repeat unit. The repeat unit consists of a pyridine ring substituted at the 2-position with an ether linkage to a side chain. The side chain is <math>[-O-CH_2-CH_2-N^+(CH_2CH_3)_3]_3</math>. The counterion is <math>I^-</math>.</p>
1393	n-ブチル	n-ブチル	H	<p>Chemical structure of a polymer repeat unit. The repeat unit consists of a phenyl ring substituted with an amine linkage to a side chain. The side chain is <math>[-NH-(CH_2)_4-N^+(CH_2CH_3)_3]_3</math>. The counterion is <math>I^-</math>.</p>
1394	n-ブチル	n-ブチル	H	<p>Chemical structure of a polymer repeat unit. The repeat unit consists of a phenyl ring substituted with an ether linkage to a side chain. The side chain is <math>[-O-CH_2-CH_2-N^+(C_5H_5)]_3</math>. The counterion is <math>I^-</math>.</p>

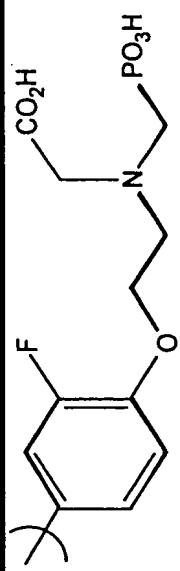
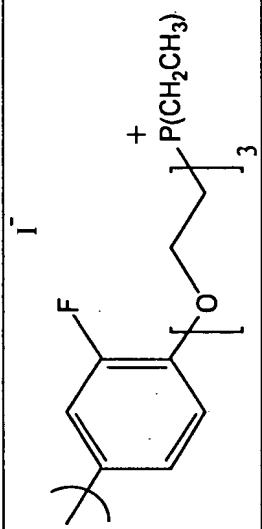
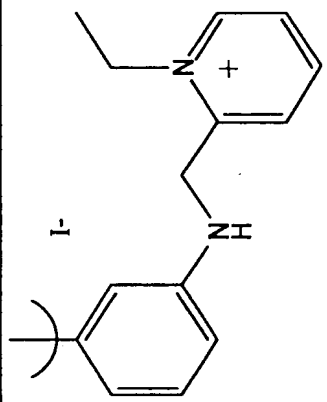
1395	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1396	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1397	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1398	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1399	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1400	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1401	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	H	
1402	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	H	
1403	n-ブチル	n-ブチル	H	OH	H	

1404	n-ブチル	n-ブチル	H	
1405	n-ブチル	n-ブチル	H	
1406	n-ブチル	n-ブチル	H	

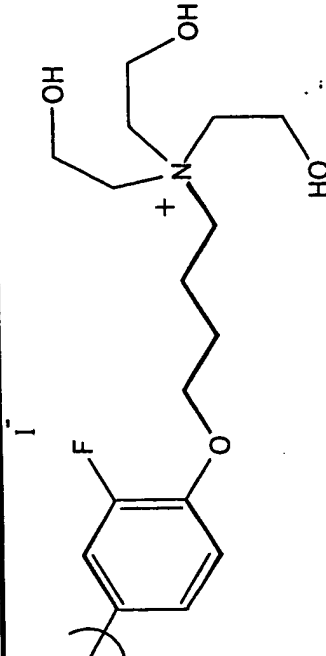
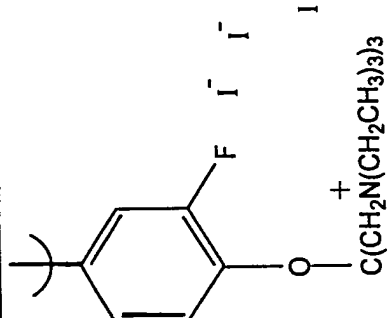
1407	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1408	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1409	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

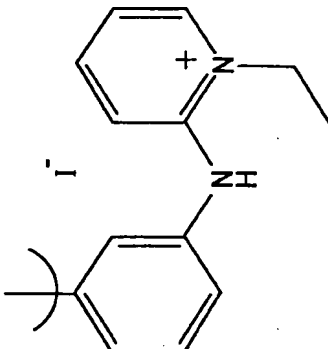
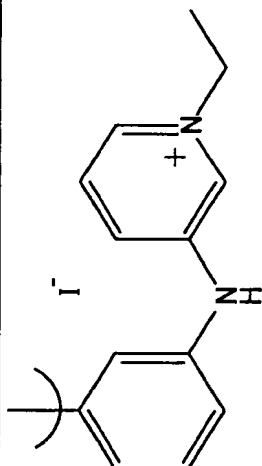
1410	n-ブチル	n-ブチル	H	
1411	n-ブチル	n-ブチル	H	
1412	n-ブチル	n-ブチル	H	

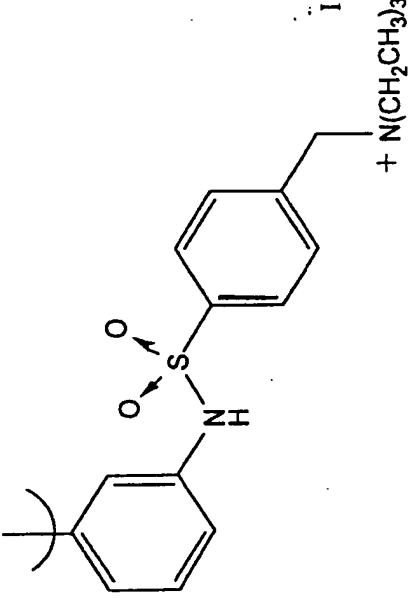
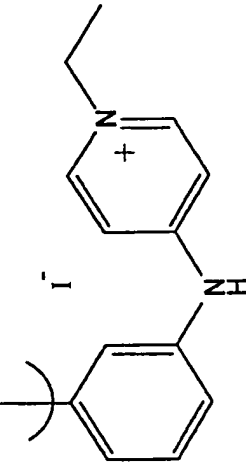
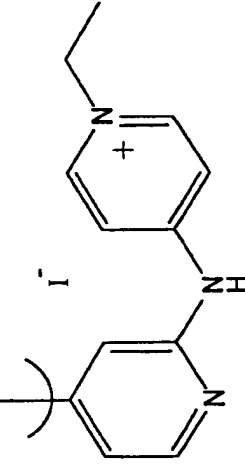
1413	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1414	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

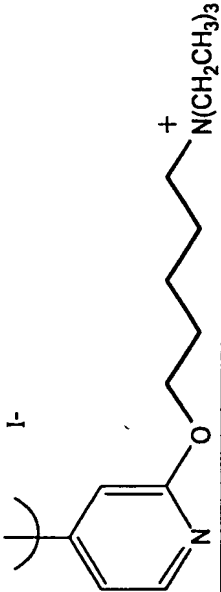
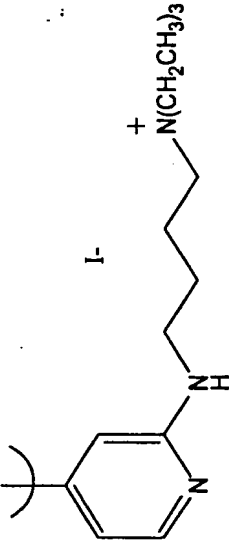
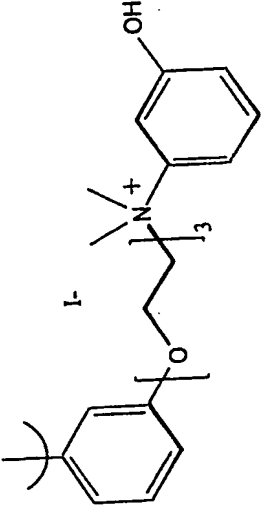


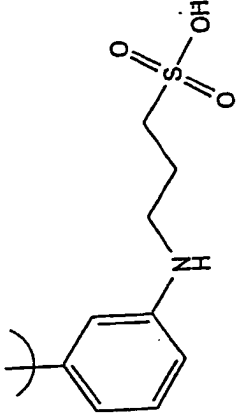
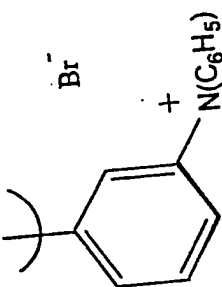
1415	n-ブチル	n-ブチル	H	
1416	n-ブチル	n-ブチル	H	
1417	n-ブチル	n-ブチル	H	

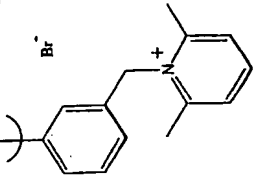
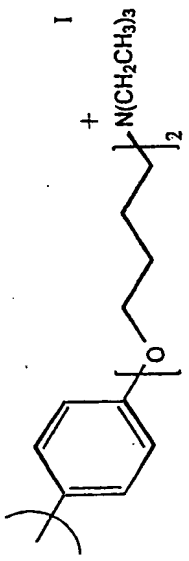
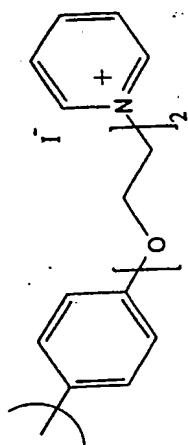
1418	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1419	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

	
H	H
OH	OH
n-ブチル	n-ブチル
n-ブチル	n-ブチル
1420	1421

1422	n-ブチル	n-ブチル	H	 + N(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
1423	n-ブチル	n-ブチル	H	
1424	n-ブチル	n-ブチル	H	

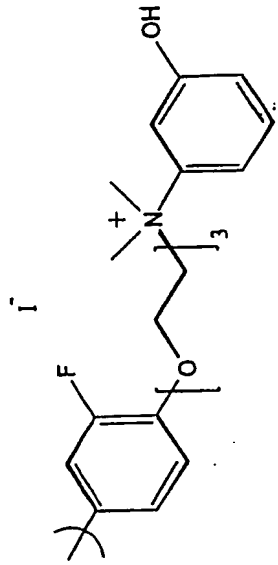
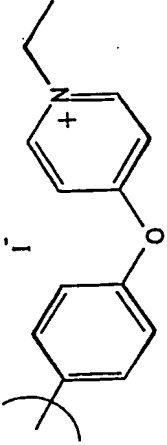
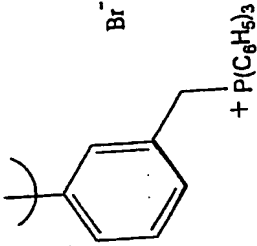
1425	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1426	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1427	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1428	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1429	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1430	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1431	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1432	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

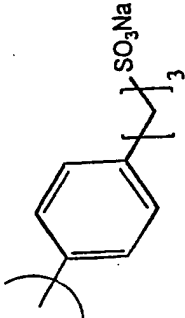
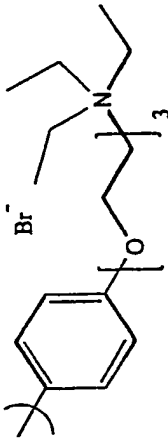
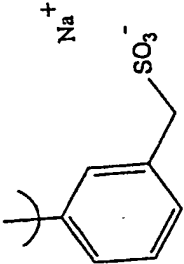
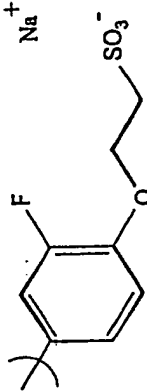
1433	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1434	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

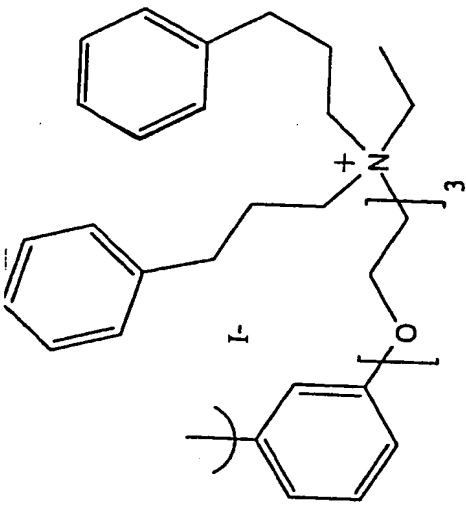
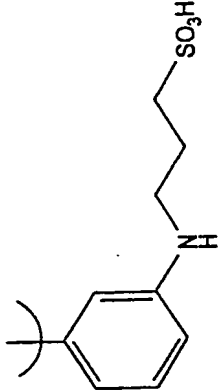


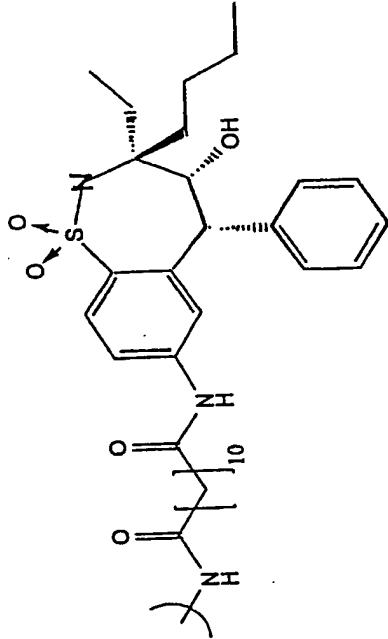
1435	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1436	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1437	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

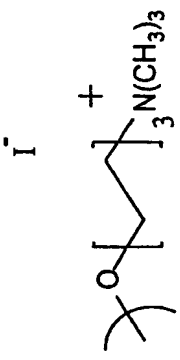
1438	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1439	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1440	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1441	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1442	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1443	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1444	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

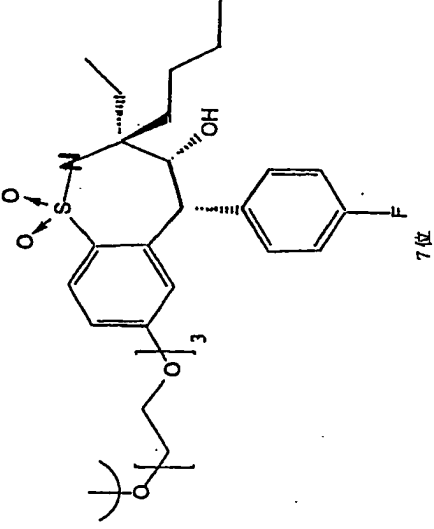
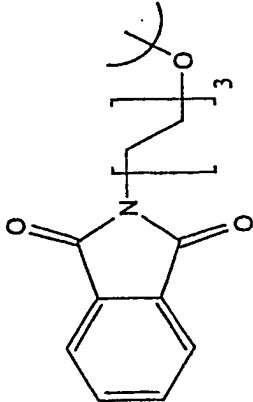
1445	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1446	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1447	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1448	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1449	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1450	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	フェニル
1451	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	


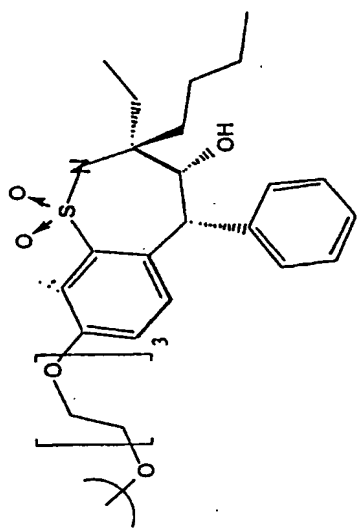
化合物番号	R6	(R <sub>3</sub> ) <sub>q</sub>
101	H	7位 
102	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
103	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
104	H	7-ジメチルアミノ
105	H	7-メタンホルンアミド
106	H	7-(2'-プロモアセトアミド)
107	H	7-アミノ
108	H	7-(ヘキシルアミノ)
109	H	7-アミノ
110	H	7-アセトアミド
111	H	7-アミノ
112	H	7-アミノ
113	H	7-アミノ
114	H	7-アミノ

115	H	7-(O-ペンジルカルバト)
116	H	7-(O-ペンジルカルバト)
117	H	7-(O-ペンジルカルバト)
118	H	7-(O-ペンジルカルバト)
119	H	7-(O-tert-ブチルカルバト)
120	H	7-(O-ペンジルカルバト)
121	H	7-アミノ
122	H	7-アミノ
123	H	7-ヘキシルアミノ
124	H	7-(ヘキシルアミノ)
125	H	
<div style="text-align: center;">  <p>I<sup>-</sup></p> </div>		
126	H	7-(O-ペンジルカルバト)
127	H	7-アミノ
128	H	7-(O-ペンジルカルバト)
129	H	7-アミノ

8 位

131	H	
132	H	
133	H	8 - (ヘキシルオキシ)



134	H	 <p>8位</p>
135	H	 <p>8位</p>
136	H	8-ヒドロキシ



142	3-メトキシフエニル	7-メチルメルカプト
143	H	7-メチルメルカプト
144	H	7-(N-アゼチニル)
262	H	7-メトキシ
263	3-メトキシフエニル	7-メトキシ
264	H	7-メトキシ
265	3-トリフルオロメチル フエニル	7-メトキシ
266	H	7-メトキシ
267	H	7-メトキシ
268	H	7-メトキシ
269	4-フルオロフエニル	7-メトキシ
270	H	7-ヒドロキシ
271	H	7-プロモ
272	3-メトキシフエニル	7-プロモ
273	4-フルオロフエニル	7-フルオロ
274	H	7-フルオロ
275	3-メトキシフエニル	7-フルオロ
276	H	7-フルオロ
277	H	7-メトキシ
278	H	7-メトキシ
279	H	7-メトキシ
280	H	7-メトキシ
281	H	7-メチルメルカプト
282	H	7-メチル
283	4-フルオロフエニル	7-メチル
284	H	7-(4'-ホルリノ)
286	H	7-(O-ベンジルカルバト)
287	H	7-アミノ
288	H	7-アミノ
289	H	7-アミノ

290	H	7-アミノ
291	H	7- (O-ベンジルカルバト)
292	H	7-アミノ
293	H	7-ベンジルアミノ
294	H	7-ジメチルアミノ
295	H	7-アミノ
296	H	7-アミノ
1000	H	7-ジメチルアミノ
1001	H	7-ジメチルアミノ
1002	H	7-ジメチルアミノ
1003	H	7-ジメチルアミノ
1004	H	7-ジメチルアミノ
1005	H	7-ジメチルアミノ
1006	H	7-ジメチルアミノ
1007	H	7-ジメチルアミノ
1008	H	7-ジメチルアミノ
1009	H	7-ジメチルアミノ
1010	H	7-ジメチルアミノ
1011	H	7-ジメチルアミノ
1012	H	7-ジメチルアミノ ; 9-メトキシ
1013	H	7-ジメチルアミノ
1014	H	7-ジメチルアミノ ; 7-メトキシ
1015	H	7-ジメチルアミノ
1016	H	7-ジメチルアミノ
1017	H	7-ジメチルアミノ
1018	H	7-ジメチルアミノ
1019	H	7-ジメチルアミノ
1020	H	7-ジメチルアミノ
1021	H	7-ジメチルアミノ
1022	H	7-ジメチルアミノ
1023	H	7-ジメチルアミノ
1024	H	7-ジメチルアミノ
1025	H	7-ジメチルアミノ

1026	H	7-ジメチルアミノ
1027	H	7-ジメチルアミノ
1028	H	7-ジメチルアミノ
1029	H	7-ジメチルアミノ
1030	H	7-ジメチルアミノ
1031	H	7-ジメチルアミノ
1032	H	7-ジメチルアミノ
1033	H	7-ジメチルアミノ
1034	H	7-ジメチルアミノ
1035	H	7-ジメチルアミノ
1036	H	7-ジメチルアミノ
1037	H	7-ジメチルアミノ
1038	H	7-ジメチルアミノ
1039	H	7-ジメチルアミノ
1040	H	7-ジメチルアミノ
1041	H	7-ジメチルアミノ
1042	H	7-ジメチルアミノ
1043	H	7-ジメチルアミノ
1044	H	7-ジメチルアミノ
1045	H	7-ジメチルアミノ
1046	H	7-ジメチルアミノ
1047	H	7-ジメチルアミノ
1048	H	7-ジメチルアミノ
1049	H	7-ジメチルアミノ
1050	H	7-ジメチルアミノ
1051	H	7-ジメチルアミノ
1052	H	7-ジメチルアミノ
1053	H	7-ジメチルアミノ
1054	H	7-ジメチルアミノ
1055	H	7-ジメチルアミノ
1056	H	7-ジメチルアミノ
1057	H	7-ジメチルアミノ
1058	H	7-ジメチルアミノ

1059	H	7-ジメチルアミノ
1060	H	7-メチルアミノ
1061	H	7-メチルアミノ
1062	H	7-メチルアミノ
1063	H	7-メチルアミノ
1064	H	7-メチルアミノ
1065	H	7-ジメチルアミノ
1066	H	7-ジメチルアミノ
1067	H	9-ジメチルアミノ
1068	H	7-ジメチルアミノ
1069	H	7-ジメチルアミノ; 9-ジメチルアミノ
1070	H	7-ジメチルアミノ
1071	H	7-ジメチルアミノ
1072	H	7-ジメチルアミノ
1073	H	7-ジメチルアミノ
1074	H	7-ジメチルアミノ
1075	H	7-ジメチルアミノ; 9-ジメチルアミノ
1076	H	7-ジメチルアミノ
1077	H	7-ジメチルアミノ
1078	H	7-ジメチルアミノ
1079	H	7-ジメチルアミノ
1080	H	7-ジメチルアミノ
1081	H	7-ジメチルアミノ
1082	H	7-ジメチルアミノ
1083	H	7-ジメチルアミノ
1084	H	7-ジメチルアミノ
1085	H	7-ジメチルアミノ
1086	H	7-ジメチルアミノ
1087	H	7-ジメチルアミノ
1088	H	7-ジメチルアミノ
1089	H	7-ジメチルアミノ
1090	H	7-ジメチルアミノ

1091	H	7-ジメチルアミノ
1092	H	7-ジメチルアミノ
1093	H	7-ジメチルアミノ
1094	H	7-ジメチルアミノ
1095	H	7-ジメチルアミノ
1096	H	7-ジメチルアミノ
1097	H	7-ジメチルアミノ
1098	H	7-ジメチルアミノ
1099	H	7-ジメチルアミノ
1100	H	7-ジメチルアミノ
1101	H	7-ジメチルアミノ
1102	H	7-ジメチルアミノ
1103	H	7-ジメチルアミノ
1104	H	7-ジメチルアミノ
1105	H	7-ジメチルアミノ
1106	H	7-ジメチルアミノ
1107	H	7-ジメチルアミノ
1108	H	7-ジメチルアミノ
1109	H	7-ジメチルアミノ
1110	H	7-ジメチルアミノ
1111	H	7-ジメチルアミノ
1112	H	7-ジメチルアミノ
1113	H	7-ジメチルアミノ
1114	H	7-メチルアミノ
1115	H	7-ジメチルアミノ
1116	H	7-ジメチルアミノ
1117	H	7-ジメチルアミノ
1118	H	7-ジメチルアミノ
1119	H	7-ジメチルアミノ
1120	H	7-ジメチルアミノ
1121	H	7-ジメチルアミノ
1122	H	7-ジメチルアミノ
1123	H	7-ジメチルアミノ

1124	H	7-ジメチルアミノ
1125	H	7-ジメチルアミノ
1126	H	7-ジメチルアミノ
1127	H	7-ジメチルアミノ
1128	H	7-ジメチルアミノ
1129	H	9-ジメチルアミノ
1130	H	7-ジメチルアミノ
1131	H	7-ジメチルアミノ
1132	H	7-ジメチルアミノ
1133	H	7-ジメチルアミノ
1134	H	7-ジメチルアミノ
1135	H	7-ジメチルアミノ
1136	H	7-ジメチルアミノ
1137	H	9-(2',2'-ジメチルビドラジソ)
1138	H	7-ジメチルアミノ
1139	H	7-ジメチルアミノ
1140	H	7-(2',2'-ジメチルビドラジソ)
1141	H	7-エチルメチルアミノ
1142	H	7-ジメチルアミノ
1143	3-フルオロ-4-メ トキシフェニル	7-ジメチルアミノ
1144	H	7-ジメチルアミノ
1145	H	9-ジメチルアミノ
1146	H	7-ジメチルアミノ
1147	H	7-ジエチルアミノ
1148	H	7-フル化ジメチルスルホニウム、フッ素酸塩
1149	H	7-エチルアミノ
1150	H	7-エチルメチルアミノ
1151	H	7-ジメチルアミノ
1152	H	7-(エトキシメチル)メチルアミノ
1153	H	7-メチルアミノ
1154	H	9-メトキシ
1155	H	7-メチル
1156	H	7-メチルメルカプト



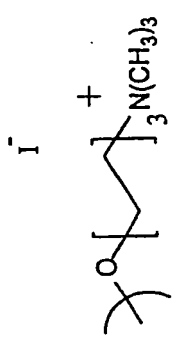
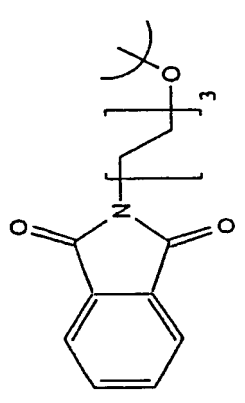
1157	H	7-フルオロ ; 9-ジメチルアミノ
1158	H	7-メトキシ
1159	H	7-ジメチルアミノ
1160	H	7-ジエチルアミノ
1161	H	7-ジメチルアミノ
1162	H	7-ジメチルアミノ
1163	H	7-メトキシ
1164	H	7-メトキシ
1165	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1166	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1167	H	7-ジメチルアミノ
1168	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1169	H	8-ジメチルアミノ
1170	H	7-エチルプロピルアミノ
1171	H	7-ジメチルアミノ
1172	H	7-メトキシ
1173	H	7-エチルプロピルアミノ
1174	H	7-フエニル
1175	H	7-メチルスルホニル
1176	H	9-フルオロ
1177	H	7-プロピルメチルアミノ
1178	H	7-ジメチルアミノ
1179	H	8-メトキシ
1180	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1181	H	7-プロピルメチルアミノ
1182	H	7-メトキシ
1183	H	7-フルオロ
1184	H	7-フルオロ ; 9-フルオロ
1185	H	7-フルオロ
1186	H	7-フルオロ ; 9-フルオロ
1187	H	7-メチル


1188	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1189	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1190	H	7-プロモ
1191	H	7-ヒドロキシ
1192	H	7-ヒドロキシ
1193	H	7-ジメチルアミノ
1194	H	7-ジメチルアミノ
1195	H	7- (4'-メチルピペラジン)
1196	H	7-メトキシ
1197	H	7- (N-メチルホルムアミド)
1198	H	7-メトキシ
1199	H	7-ジメチルアミノ
1200	フェニル	7-ジメチルアミノ
1201	H	7-メチル
1202	H	7-メトキシ
1203	H	7- (4'-tert-ブチルフェニル)
1204	H	7-メトキシ
1205	H	7-ジメチルアミノ
1206	H	7-ジメチルアミノ
1207	H	7-ジメチルアミノ
1208	H	7-ジメチルアミノ
1209	H	7-ジメチルフェニル
1210	H	7-ジメチルアミノ
1211	H	7-ジメチルアミノ
1212	H	9- (4'-モルフォリノ)
1213	3-フルオロ-4-メ トキシフェニル	7-ジメチルアミノ
1214	H	7- (N-メチルホルムアミド)
1215	H	9-メチルメルカプト
1216	H	7-プロモ
1217	H	7-ジメチルアミノ
1218	H	9-メチルスルホニル
1219	H	7-ジメチルアミノ
1220	H	7-イソプロピルアミノ

1221	H	7-ジメチルアミノ
1222	H	7-エチルアミノ
1223	H	8-プロモ; 7-メチルアミノ
1224	H	7-フルオロ
1225	H	7-ジメチルアミノ
1226	H	7-プロモ
1227	H	7-(tert-ブチルアミノ)
1228	H	8-プロモ; 7-ジメチルアミノ
1229	H	7-ジメチルアミノ
1230	H	9-ジメチルアミノ; 7-フルオロ
1231	H	7-ジメチルアミノ
1232	H	9-ジメチルアミノ
1233	H	7-ジメチルアミノ
1234	H	7-ジメチルアミノ
1235	H	7-ジメチルアミノ
1236	H	7-ジメチルアミノ
1237	H	7-ジメチルアミノ
1238	H	7-ジメチルアミノ
1239	H	7-ジメチルアミノ
1240	H	7-ジメチルアミノ
1241	H	7-ジメチルアミノ
1242	H	7-ジメチルアミノ
1243	H	7-ジメチルアミノ
1244	H	7-(1'-メチルピドラジソ)
1245	H	7-ジメチルアミノ
1246	H	7-ジメチルアミノ
1247	H	7-ジメチルアミノ
1248	H	7-ジメチルアミノ
1249	H	7-ジメチルアミノ

1250	H	7-ジメチルアミノ
1251	H	7-ジメチルアミノ
1252	H	7-ジメチルアミノ
1253	H	7-ジメチルアミノ
1254	H	7-ジメチルアミノ
1255	H	7-ジメチルアミノ
1256	H	7-ジメチルアミノ
1257	H	8-プロモ; 7-ジメチルアミノ
1258	H	9- (tert-ブチルアミノ)
1259	フェニル	7-ジメチルアミノ
1260	H	7-ジメチルアミノ
1261	H	7-ジメチルアミノ
1262	H	7-ジメチルアミノ
1263	H	7-プロモ
1264	H	7-イソプロピルアミノ
1265	H	9-イソプロピルアミノ
1266	H	7-ジメチルアミノ
1267	H	7-カルボキシ, メチルエスチル
1268	H	7-ジメチルアミノ
1269	H	7-ジメチルアミノ
1270	H	7-ジメチルアミノ
1271	H	7-ジメチルアミノ
1272	H	7-ジメチルアミノ
1273	H	7-ジメチルアミノ
1274	H	7-ジメチルアミノ
1275	H	7-ジメチルアミノ
1276	H	7-ジメチルアミノ
1277	H	7-ジメチルアミノ
1278	H	7-ジメチルアミノ
1279	H	7-ジメチルアミノ
1280	H	7-ジメチルアミノ
1281	H	7-ジメチルアミノ
1282	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム

1283	H	7-ジメチルアミノ
1284	H	9-エチルアミノ
1285	H	7-ジメチルアミノ
1286	H	7-ジメチルアミノ
1287	H	7-ジメチルアミノ
1288	H	7-ジメチルアミノ
1289	H	7-ジメチルアミノ
1290	H	7-ジメチルアミノ
1291	H	7-ジメチルアミノ
1292	H	7-ジメチルアミノ
1293	H	7-ジメチルアミノ
1294	H	7-ジメチルアミノ
1295	H	7-ジメチルアミノ
1296	H	7-ジメチルアミノ
1297	H	7-ジメチルアミノ
1298	H	7-ジメチルアミノ
1299	H	7-ジメチルアミノ
1300	フェニル	7-ジメチルアミノ
1301	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1302	H	9-ヒドロキシ
1303	H	7-ジメチルアミノ
1304	H	7-tert-ブチルアミノ
1305	H	9-メチルアミノ
1306	H	7-ジメチルアミノ
1307	4-メトキシフェニル	9-(4'-モルフォリノ)
1308	H	7-ジメチルアミノ
1309	H	9-フルオロ
1310	H	7-アミノ
1311	H	7-(ヒドロキシアミノ)
1312	H	8-ヘキシルオキシ
1313	H	7-エトキシ
1314	H	7-(ヒドロキシアミノ)
1315	H	7-ヘキシルオキシ

1316	H	8-ヒドロキシ
1317	H	
		 $\text{I}^-$
1318	H	7-ジメチルアミノ
1319	H	7-フルオロ
1320	H	7-アミノ
1321	H	
		 8位
1322	H	7-ジメチルアミノ
1323	H	7-ジメチルアミノ
1324	H	7-ジメチルアミノ
1325	H	7-ジメチルアミノ
1326	H	7-ジメチルアミノ
1327	H	7-ジメチルアミノ
1328	H	7-ジメチルアミノ
1329	H	7-ジメチルアミノ
1330	H	7-ジメチルアミノ
1331	H	7-ジメチルアミノ
1332	H	7-ジメチルアミノ
1333	H	7-ジメチルアミノ

1334	H	7-ジメチルアミノ
1335	H	7-ジメチルアミノ
1336	H	7-ジメチルアミノ
1337	H	7-ジメチルアミノ
1338	H	7-(4'-メチルピペラジニル)
1339	H	7-ジメチルアミノ
1340	H	7-メチル
1341	H	7-ジメチルアミノ
1342	H	7-(4'-フルオロフェニル)
1343	H	7-アミノ
1344	H	7-ジメチルアミノ
1345	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1346	H	
		
1347	H	7-ジメチルアミノ
1348	H	7-ジメチルアミノ
1349	H	7-ジメチルアミノ
1350	H	7-ヨウ化トリメチルアンモニウム
1351	H	7-ジメチルアミノ
1352	H	7-ジメチルアミノ
1353	H	7-ジメチルアミノ
1354	H	7-ジメチルアミノ
1355	H	7-ジメチルアミノ
1356	H	7-ジメチルアミノ
1357	H	7-ジメチルアミノ
1358	H	7-ジメチルアミノ
1359	H	7-ジメチルアミノ
1360	H	7-ジメチルアミノ
1361	H	7-ジメチルアミノ
1362	H	7-ジメチルアミノ

8 位

1363	H	7-ジメチルアミノ
1364	H	7-ジメチルアミノ
1365	H	7-ジメチルアミノ
1366	H	7-ジメチルアミノ
1367	H	7-ジメチルアミノ
1368	H	7-ジメチルアミノ
1369	H	7-ジメチルアミノ
1370	H	7-ジメチルアミノ
1371	H	7-ジメチルアミノ
1372	H	7-ジメチルアミノ
1373	H	7-ジメチルアミノ
1374	H	7-ジメチルアミノ
1375	H	7-ジメチルアミノ
1376	H	7-ジメチルアミノ
1377	H	7-ジメチルアミノ
1378	H	7-ジメチルアミノ
1379	H	7-ジメチルアミノ
1380	H	7-ジメチルアミノ
1381	H	7-ジメチルアミノ
1382	H	7-ジメチルアミノ
1383	H	7-ジメチルアミノ
1384	H	7-ジメチルアミノ
1385	H	7-ジメチルアミノ
1386	H	7-ジメチルアミノ
1387	H	7-ジメチルアミノ
1388	H	7-ジメチルアミノ
1389	H	7-ジメチルアミノ
1390	H	7-ジメチルアミノ
1391	H	7-ジメチルアミノ
1392	H	7-ジメチルアミノ
1393	H	7-ジメチルアミノ
1394	H	7-ジメチルアミノ
1395	H	7-ジメチルアミノ



1396	H	7-ジメチルアミノ
1397	H	7-ジメチルアミノ
1398	H	7-ジメチルアミノ
1399	H	7-ジメチルアミノ
1400	H	7-ジメチルアミノ
1401	H	7-ジメチルアミノ
1402	H	7-ジメチルアミノ
1403	H	7-ジメチルアミノ
1404	H	7-ジメチルアミノ
1405	H	7-ジメチルアミノ
1406	H	7-ジメチルアミノ
1407	H	7-ジメチルアミノ
1408	H	7-ジメチルアミノ
1409	H	7-ジメチルアミノ
1410	H	7-ジメチルアミノ
1411	H	7-ジメチルアミノ
1412	H	7-ジメチルアミノ
1413	H	7-ジメチルアミノ
1414	H	7-ジメチルアミノ
1415	H	7-ジメチルアミノ
1416	H	7-ジメチルアミノ
1417	H	7-ジメチルアミノ
1418	H	7-ジメチルアミノ
1419	H	7-ジメチルアミノ
1420	H	7-ジメチルアミノ
1421	H	7-ジメチルアミノ
1422	H	7-ジメチルアミノ
1423	H	7-ジメチルアミノ
1424	H	7-ジメチルアミノ
1425	H	7-ジメチルアミノ
1426	H	7-ジメチルアミノ
1427	H	7-ジメチルアミノ
1428	H	7-ジメチルアミノ

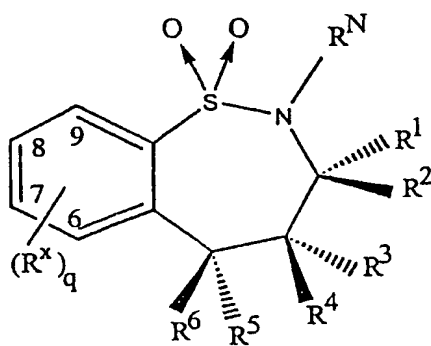
1429	H	7-ジメチルアミノ
1430	H	7-ジメチルアミノ
1431	H	7-ジメチルアミノ
1432	H	7-ジメチルアミノ
1433	H	7-ジメチルアミノ
1434	H	7-ジメチルアミノ
1435	H	7-ジメチルアミノ
1436	H	7-ジメチルアミノ
1437	H	7-ジメチルアミノ
1438	H	7-ジメチルアミノ
1439	H	7-ジメチルアミノ
1440	H	7-ジメチルアミノ
1441	H	7-ジメチルアミノ
1442	H	7-ジメチルアミノ
1443	H	7-ジメチルアミノ
1444	H	7-ジメチルアミノ
1445	H	7-ジメチルアミノ
1446	H	7-メトキシ；8-メトキシ
1447	H	7-ジメチルアミノ
1448	H	7-ジメチルアミノ
1449	H	7-ジメチルアミノ
1450	H	7-ジメチルアミノ
1451	H	7-ジメチルアミノ

## 【0136】

特に対象となる他のクラスの化合物は、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^N$ および $R^X$ ラジカルが下記表2に記載されたラジカルから選択される、これらの1,2-ベンゾチアゼピンを含む。好ましくは、 $R^6$ が水素であり、且つ $R^5$ が水素以外であり；および／または $R^3$ がヒドロキシであり、且つ $R^4$ が水素であり；および／または $R^1$ および $R^2$ がアルキルである。より好ましくは、 $R^1$ および $R^2$ が同一である。

## 【0137】

【表 2】



$R^1/R^2$	$R^3/R^4$	$R^5/R^6$	$(R^x)_q$	$R^N$
エチル n-プロピル n-ブチル n-ペンチル n-ヘキシル イソプロピル イソブチル イソペンチル $CH_2OC_2H_5$ $CH_2O-(4-$ ピコリン) $CH_2CH_2CH_2$ $CF_3$	HO- H-	H Ph- p-F-Ph- m-F-Ph- p- $CH_3O$ -Ph- p-HO-Ph- m- $CH_3O$ -Ph- m-HO-Ph- p- $(CH_3)_2N$ -Ph- m- $(CH_3)_2N$ -Ph- p- $H_2N$ -Ph- m- $H_2N$ -Ph- I, p- $(CH_3)_3-N^+$ -Ph- I, m- $(CH_3)_3-N^+$ -Ph- I-, p- $(CH_3)_3-N^+-CH_2CH_2-$ $(OCH_2CH_2)_2-O$ -Ph- I, m- $(CH_3)_3-N+-CH_2CH_2-$ $(OCH_2CH_2)_2-O$ -Ph- I, p-(N,N-ジメチル- ピペラジン)-(N')- $CH_2-$ $(OCH_2CH_2)_2-O$ -Ph- I, m-(N,N-ジメチル- ピペラジン)-(N')- $CH_2-$ $(OCH_2CH_2)_2-O$ -Ph- m-F, p- $CH_3O$ -Ph- 3,4,ジオキシメチレン-Ph m- $CH_3O$ -, p-F-Ph- 4-ピリジン N-メチル-4-ピリジニウ ム, I 3-ピリジン N-メチル-3-ピリジニウ ム, I 2-ピリジン p- $CH_3O_2C$ -Ph- チエニル-2-イル 5-Cl-チエニル-2-イル	7-メチル 7-エチル 7-イソプロピル 7-tert-ブチル 7-OH 7- $OCH_3$ 7-O(イソプロピル) 7- $SCH_3$ 7- $SOCH_3$ 7- $SO_2CH_3$ 7- $SCH_2CH_3$ 7- $NH_2$ 7-NHOH 7-NH $CH_3$ 7-N $(CH_3)_2$ 7-N $^+(CH_3)_3$ , I 7-NHC(O) $CH_3$ 7-N $(CH_2CH_3)_2$ 7-NMe $CH_2CO_2H$ 7-N $^+(Me)_2CH_2CO_2H$ , I 7-(N)-モルホリン 7-(N)-アゼチジン 7-(N)-N-メチルアゼチジ ニウム, I 7-(N)-ピロリジ ン 7-(N)-N-メチル-ピロリジ ニウム, I 7-(N)-N-メチ ル- モルホリニウム, I 7-(N)-N'-メチルピペラジ ン 7-(N)-N'-ジメチルピペラ ジニウム, I 7-NH-CBZ 7-NHC(O) $C_5H_{11}$ 7-NHC(O) $CH_2Br$ 7-NH-C(NH) $NH_2$ 7-(2)-チオフェン 8-メチル 8-エチル 8-イソプロピル 8-tert-ブチル 8-OH 8- $OCH_3$	H- メチル エチル n-プロピル n-ブチル n-ペンチル n-ヘキシル ベンジル

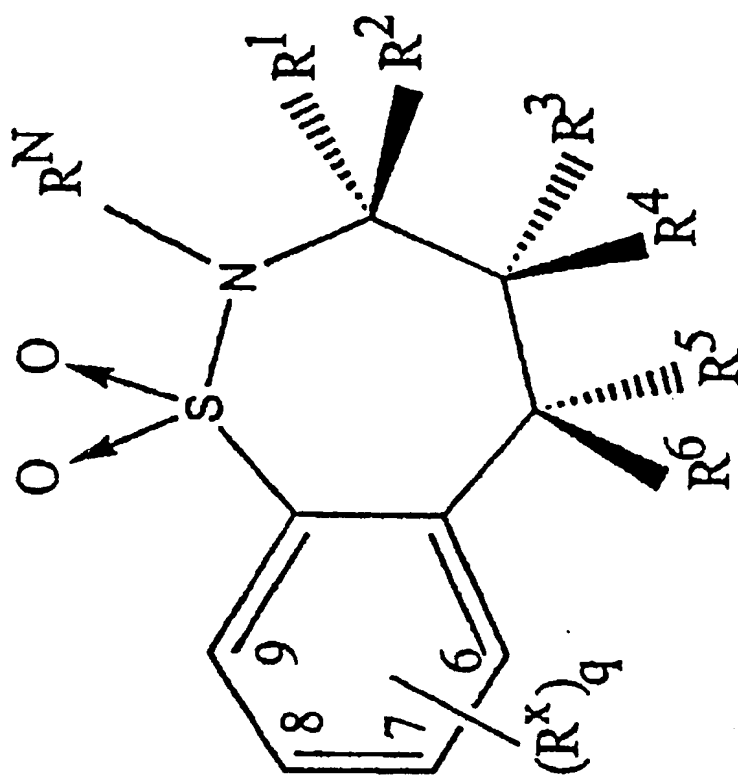
$R^1/R^2$	$R^3/R^4$	$R^5/R^6$	$(R^x)_q$	$R^N$
			8-O(イソプロピル) 8-SCH <sub>3</sub> 8-SOCH <sub>3</sub> 8-SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> 8-SCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> 8-NH <sub>2</sub> 8-NHOH 8-NHCH <sub>3</sub> 8-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 8-N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> , I <sup>-</sup> 8-NHC(O)CH <sub>3</sub> 8-N(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 8-NMeCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> H 8-N <sup>+</sup> (Me) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> H, I <sup>-</sup> 8-(N)-モルホリン 8-(N)-アゼチジン 8-(N)-N-メチルアゼチニウム, I <sup>-</sup> 8-(N)-ピロリジン 8-(N)-N-メチル-ピロリジ ニウム, I <sup>-</sup> 8-(N)-N-メチ ル- モルホリニウム, I <sup>-</sup> 8-(N)-N'-メチルピペラジ ン 8-(N)-N'-ジメチルピペラ ジニウム, I <sup>-</sup> 8-NH-CBZ 8-NHC(O)C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> 8-NHC(O)CH <sub>2</sub> Br 8-NH-C(NH)NH <sub>2</sub> 8-(2)-チオフエン 9-メチル 9-エチル 9-イソプロピル 9-tert-ブチル 9-OH 9-OCH <sub>3</sub> 9-O(イソプロピル) 9-SCH <sub>3</sub> 9-SOCH <sub>3</sub> 9-SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> 9-N <sup>+</sup> (Me) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> H, I <sup>-</sup>	

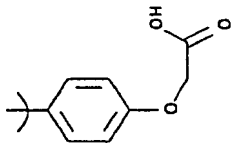
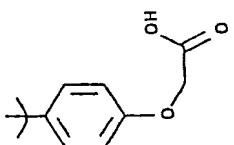
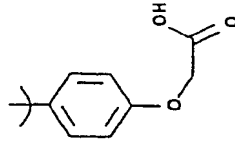
$R^1/R^2$	$R^3/R^4$	$R^5/R^6$	$(R^x)_q$	$R^N$
			9-SCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> 9-NH <sub>2</sub> 9-NHOH 9-NHCH <sub>3</sub> 9-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 9-N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> , I <sup>-</sup> 9-NHC(O)CH <sub>3</sub> 9-N(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 9-NMeCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> H 9-(N)-モルホリン 9-(N)-アゼチジン 9-(N)-N-メチルアゼチジ ニウム, I <sup>-</sup> 9-(N)-ピロリジン 9-(N)-N-メチル-ピロリジ ニウム, I <sup>-</sup> 9-(N)-N- メチル-モルホリニ ウム, I <sup>-</sup> 9-(N)-N'-メチルピペラジ ン 9-(N)-N'-ジメチル- ピペラジニウム, I <sup>-</sup> 9-NH-CBZ 9-NHC(O)C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> 9-NHC(O)CH <sub>2</sub> Br 9-NH-C(NH)NH <sub>2</sub> 9-(2)-チオフェン 7-OCH <sub>3</sub> , 8-OCH <sub>3</sub> 7-SCH <sub>3</sub> , 8-OCH <sub>3</sub> 7-SCH <sub>3</sub> , 8-SCH <sub>3</sub> 6-OCH <sub>3</sub> , 7-OCH <sub>3</sub> , 8-OCH <sub>3</sub>	

## 【0138】

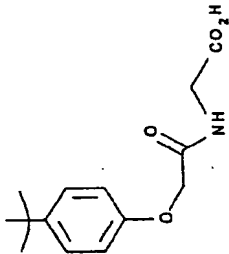
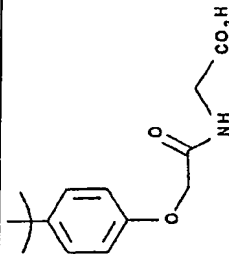
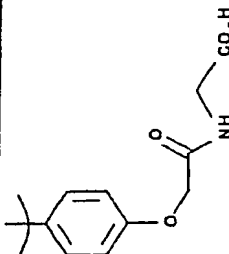
特に対象となる他のクラスの化合物は、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$  および  $R^5$  ラジカルが下記表3に示されたこれらの1,2-ベンゾチアゼピンを含み； $R^6$  ラジカルが水素であり； $R^N$  ラジカルが、水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、*n*-ブチル、*n*-ペンチル、*n*-ヘキシル、およびベンジルからなる群より選択され；かつ、1個または複数の  $R^x$  ラジカルがそれぞれ独立して下記表2に記された  $R^x$  ラジカルより選択される。表3の化合物の態様において、例えば、 $q$ は1であり、 $R^x$  は、7-ジメチルアミノである。

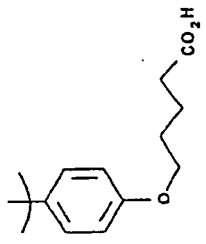
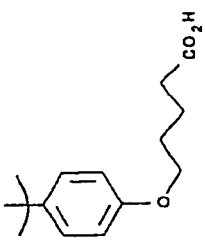
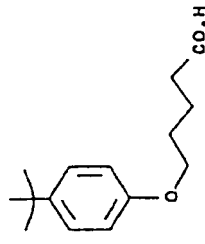
## 【表3】

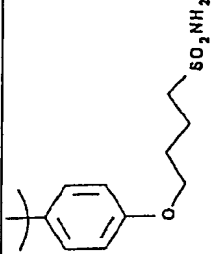
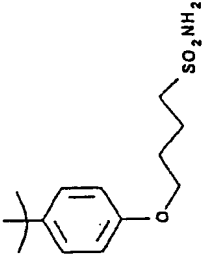
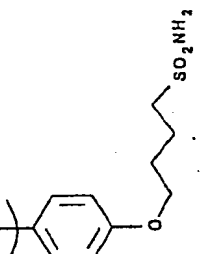


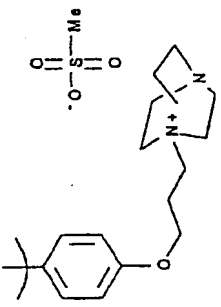
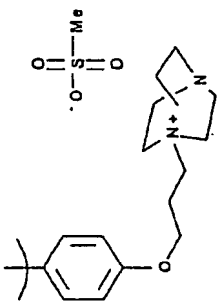
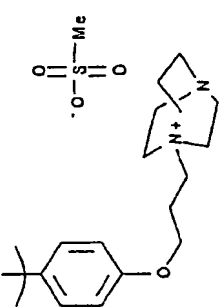
化合物番号	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>
1452	エチル	n-ブチル	OH	H	
1453	n-ブチル	エチル	OH	H	
1454	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

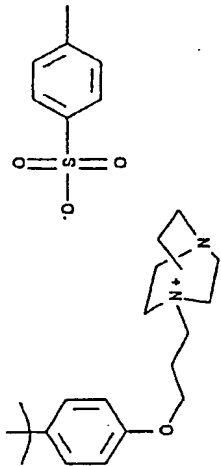
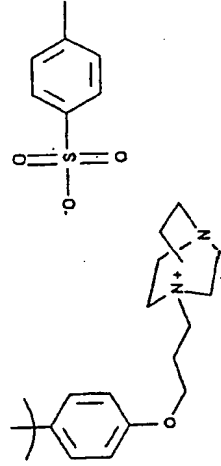
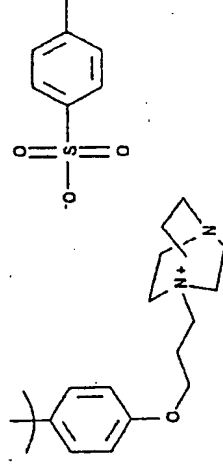


1455	エチル	n-ブチル	OH	H	
1456	n-ブチル	エチル	OH	H	
1457	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1458	エチル	n-ブチル	OH	H	
1459	n-ブチル	エチル	OH	H	
1460	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

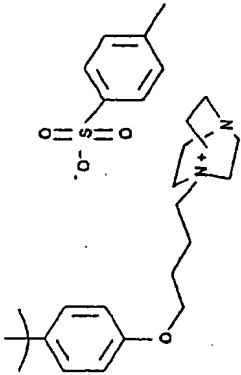
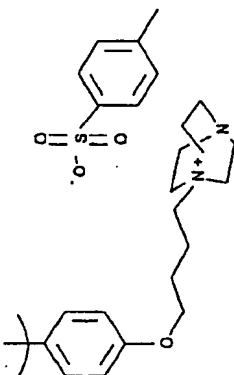
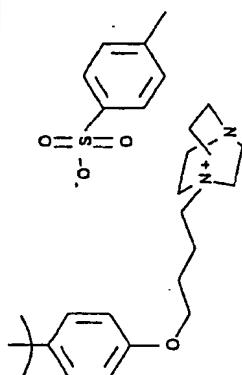
1461	エチル	n-ブチル	OH	H	
1462	n-ブチル	エチル	OH	H	
1463	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1464	エチル	n-ブチル	OH	H	
1465	n-ブチル	エチル	OH	H	
1466	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1467	エチル	n-ブチル	OH	H	
1468	n-ブチル	エチル	OH	H	
1469	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

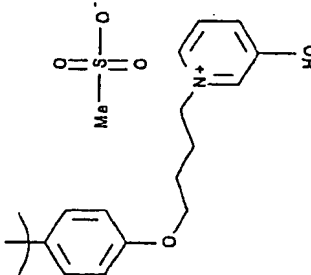
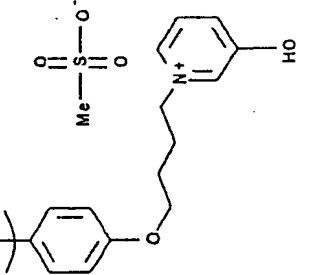
12

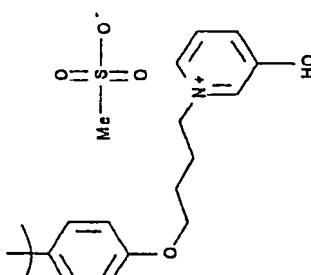
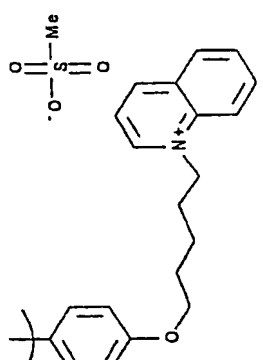
1470	エチル	n-ブチル	OH	H	
1471	n-ブチル	エチル	OH	H	
1472	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1473	エチル	n-ブチル	OH	H	
1474	n-ブチル	エチル	OH	H	
1475	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

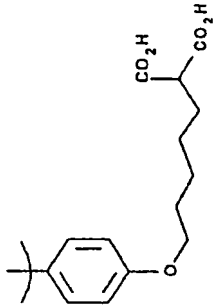
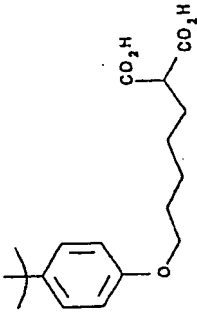
1476	エチル	n-ブチル	OH	H	
1477	n-ブチル	エチル	OH	H	
1478	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	




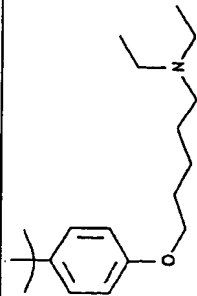
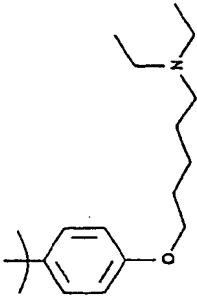
1479	エチル	n-ブチル	OH	H	
1480	n-ブチル	エチル	OH	H	

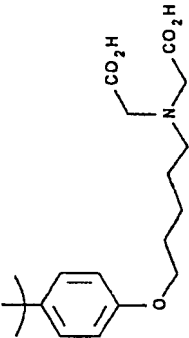
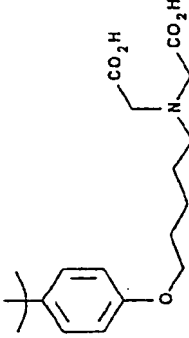
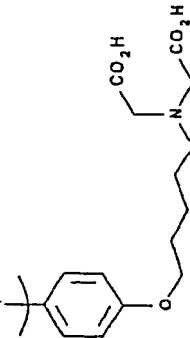
1481	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1482	エチル	n-ブチル	OH	H	

1483	n-ブチル	エチル	OH	H	
1484	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1485	エチル	n-ブチル	OH	H	

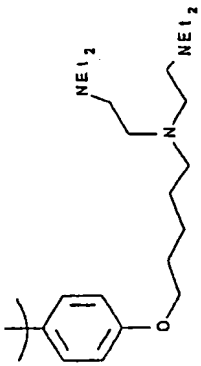
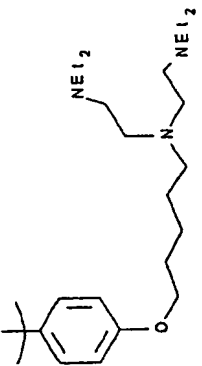
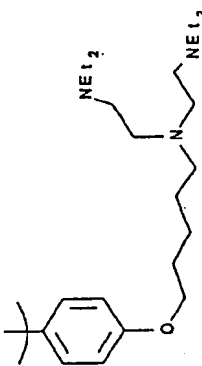
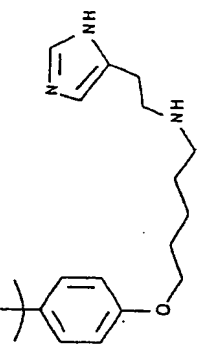
1486	n-ブチル	エチル	OH	H	
1487	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

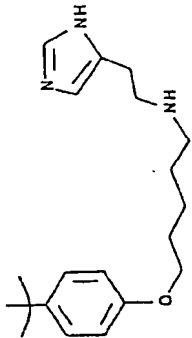
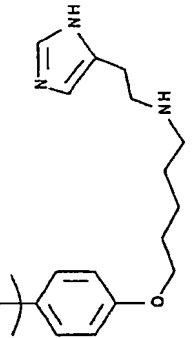
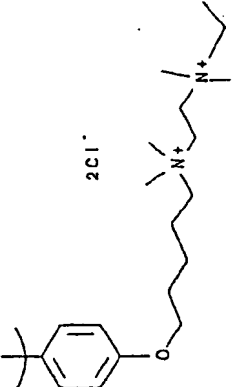
17

1488	エチル	n-ブチル	OH	H	
1489	n-ブチル	エチル	OH	H	
1490	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1491	エチル	n-ブチル	OH	H	
1492	n-ブチル	エチル	OH	H	
1493	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

21

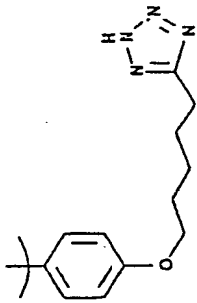
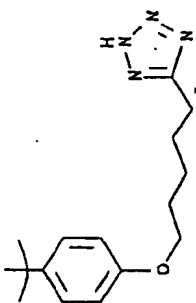
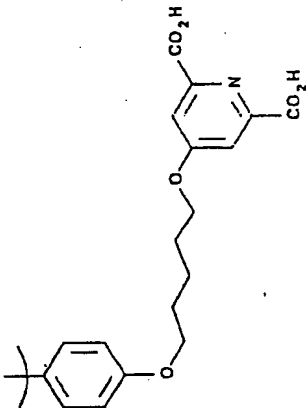
1494	エチル	n-ブチル	OH	H	
1495	n-ブチル	エチル	OH	H	
1496	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1497	エチル	n-ブチル	OH	H	

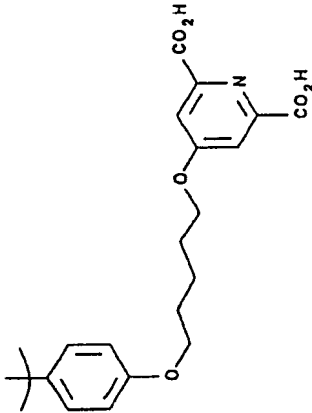
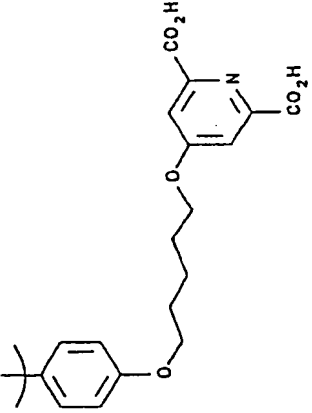
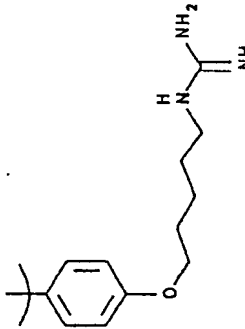
1498	n-ブチル	エチル	OH	H	
1499	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1500	エチル	n-ブチル	OH	H	

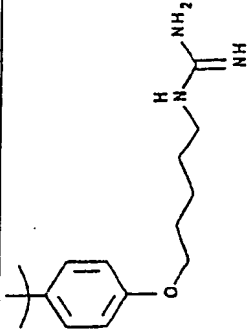
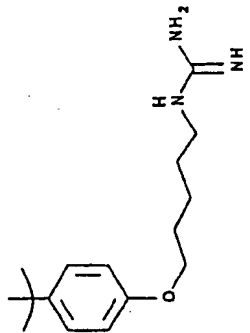
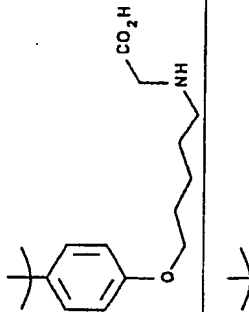
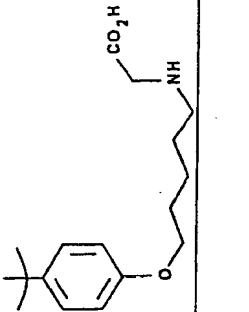


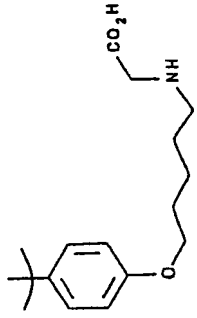
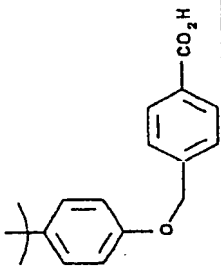
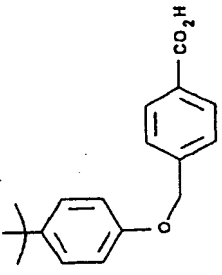
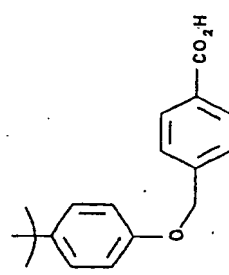
1501	n-ブチル	エチル	OH	H	
1502	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1503	エチル	n-ブチル	OH	H	

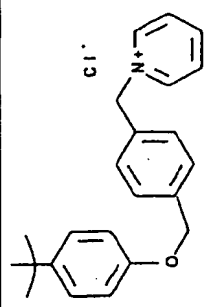
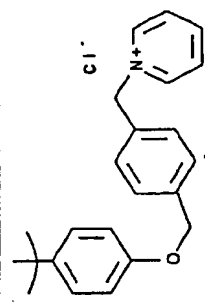
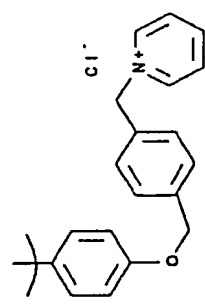
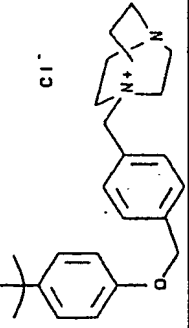
1504	n-ブチル	エチル	OH	H	
1505	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1506	エチル	n-ブチル	OH	H	

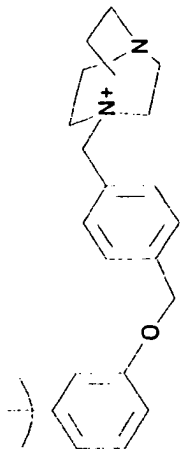
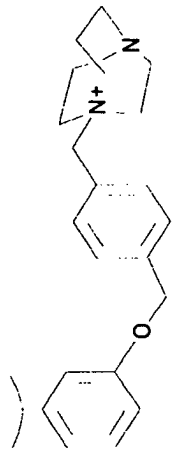
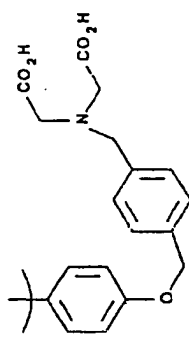
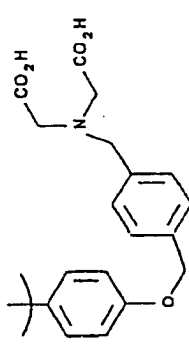
1507	n-ブチル	エチル	OH	H	
1508	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1509	エチル	n-ブチル	OH	H	

1510	n-ブチル	エチル	OH	H	
1511	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1512	エチル	n-ブチル	OH	H	

1513	n-ブチル	エチル	OH	H	
1514	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1515	エチル	n-ブチル	OH	H	
1516	n-ブチル	エチル	OH	H	

1517	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1518	エチル	n-ブチル	OH	H	
1519	n-ブチル	エチル	OH	H	
1520	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

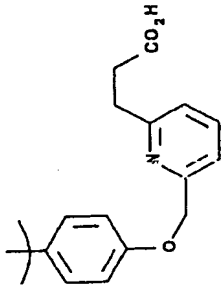
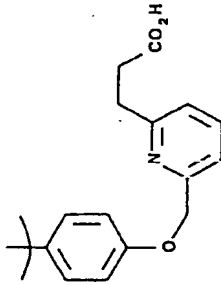
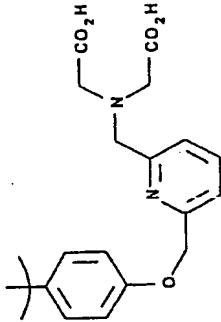
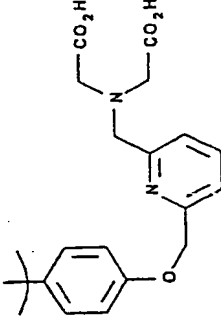
1521	エチル	n-ブチル	OH	H	
1522	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1523	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1524	エチル	n-ブチル	OH	H	

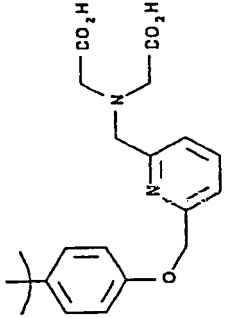
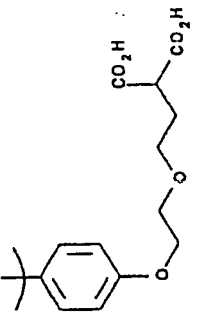
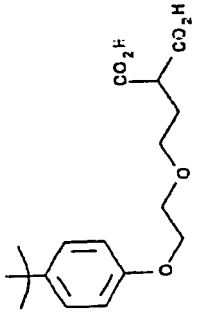
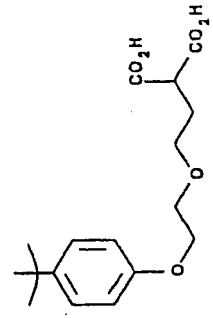
1525	n-ブチル	エチル	OH	H	
1526	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1527	エチル	n-ブチル	OH	H	
1528	n-ブチル	エチル	OH	H	

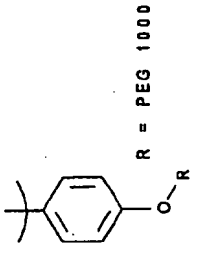
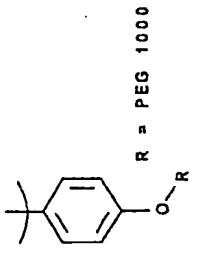
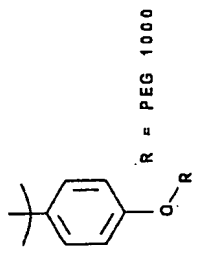
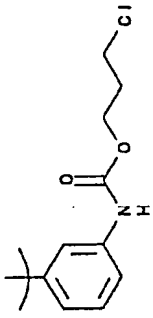


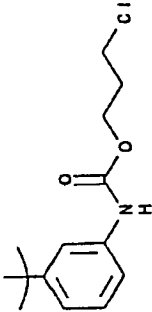
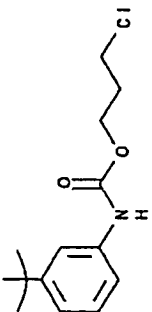
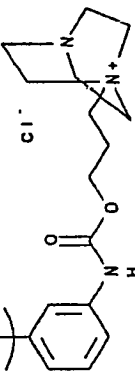
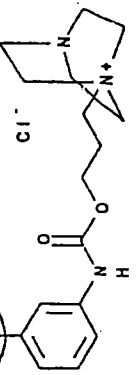
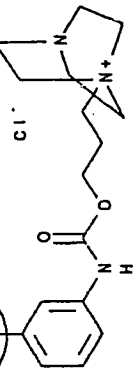
1529	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1530	エチル	n-ブチル	OH	H	
1531	n-ブチル	エチル	OH	H	
1532	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

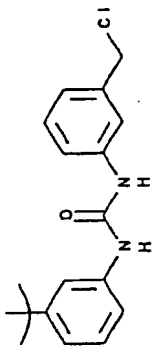
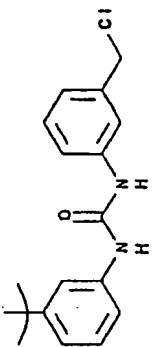
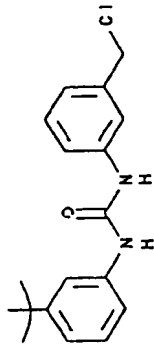
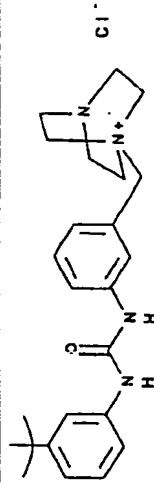
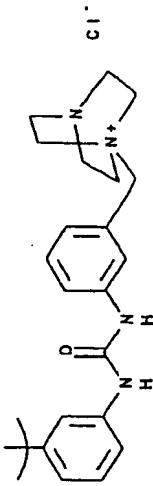
1533	エチル	n-ブチル	OH	H	
1534	n-ブチル	エチル	OH	H	
1535	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1536	エチル	n-ブチル	OH	H	

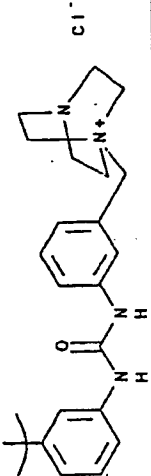
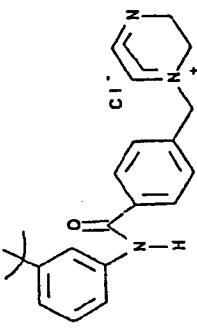
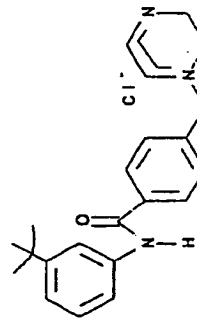
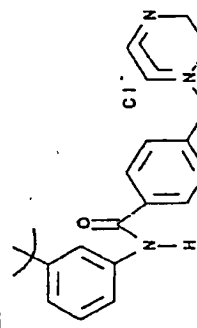
1537	n-ブチル	エチル	OH	H	
1538	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1539	エチル	n-ブチル	OH	H	
1540	n-ブチル	エチル	OH	H	

1541	n-ブチル	n-ブチル	OH	H			
1542	エチル	n-ブチル	OH	H			
1543	n-ブチル	エチル	OH	H			
1544	n-ブチル	n-ブチル	OH	H			

1545	エチル	n-ブチル	OH	H	 R = PEG 1000
1546	n-ブチル	エチル	OH	H	 R = PEG 1000
1547	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	 R = PEG 1000
1548	エチル	n-ブチル	OH	H	

1549	n-ブチル	エチル	OH	H	
1550	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1551	エチル	n-ブチル	OH	H	
1552	n-ブチル	エチル	OH	H	
1553	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1554	エチル	n-ブチル	OH	H	
1555	n-ブチル	エチル	OH	H	
1556	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1557	エチル	n-ブチル	OH	H	
1558	n-ブチル	エチル	OH	H	

1559		n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1560		エチル	n-ブチル	OH	H	
1561		n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1562		n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

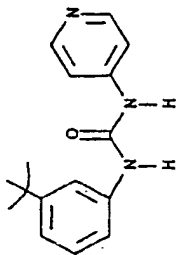
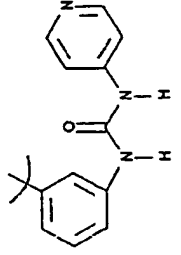
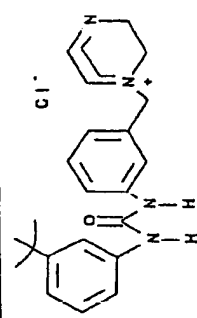
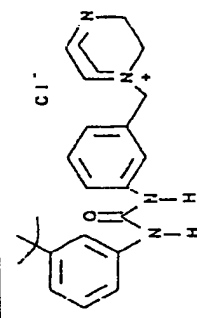


1563	エチル	n-ブチル	OH	H	
1564	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1565	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1566	エチル	n-ブチル	OH	H	

1567	n-ブチル	エチル	OH	H	
1568	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1569	エチル	n-ブチル	OH	H	
1570	n-ブチル	エチル	OH	H	

41

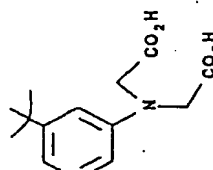
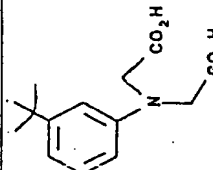
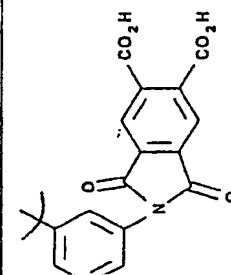
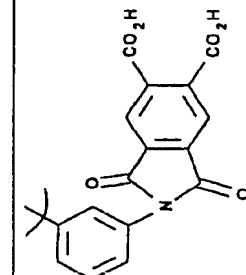
1571	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1572	エチル	n-ブチル	OH	H	
1573	n-ブチル	エチル	OH	H	
1574	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1575	エチル	n-ブチル	OH	H	

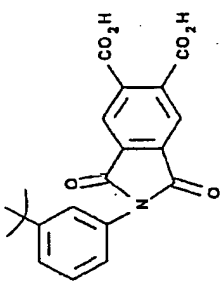
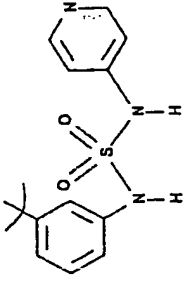
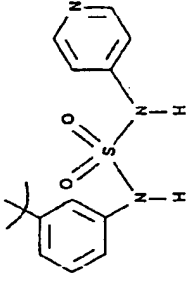
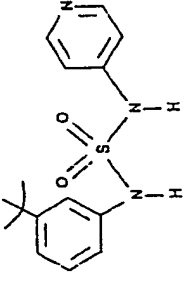
1576	n-ブチル	エチル	OH	H	
1577	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1578	エチル	n-ブチル	OH	H	
1579	n-ブチル	エチル	OH	H	

1580	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1581	エチル	n-ブチル	OH	H	
1582	n-ブチル	エチル	OH	H	
1583	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

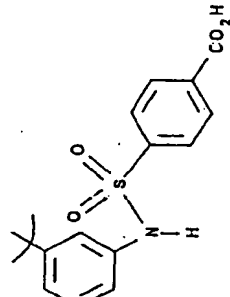
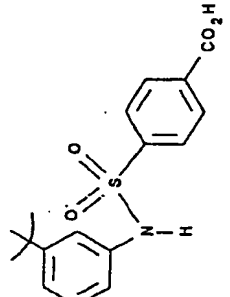
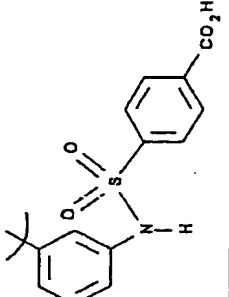
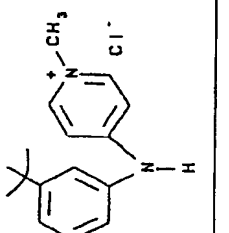
1584	エチル	n-ブチル	OH	H	
1585	n-ブチル	エチル	OH	H	
1586	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1587	エチル	n-ブチル	OH	H	

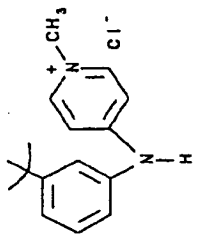
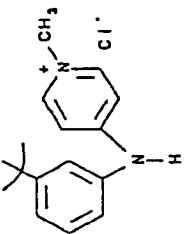
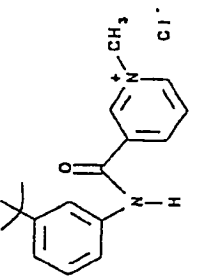
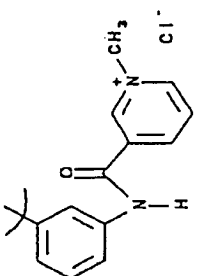
43

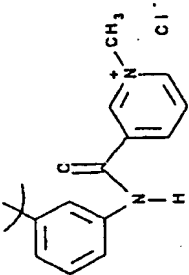
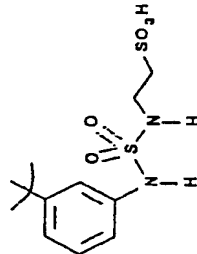
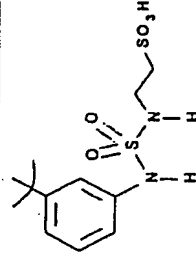
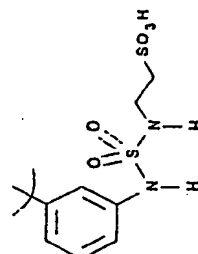
1588	n-ブチル	エチル	OH	H	
1589	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1590	エチル	n-ブチル	OH	H	
1591	n-ブチル	エチル	OH	H	

1592	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1593	エチル	n-ブチル	OH	H	
1594	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1595	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

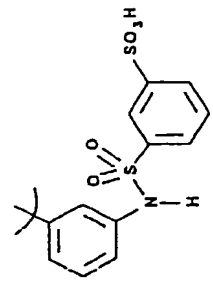
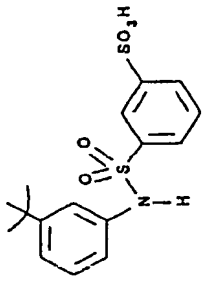
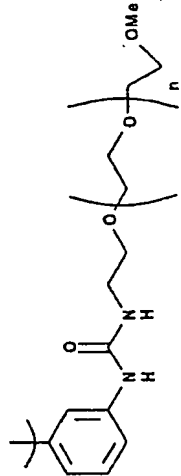
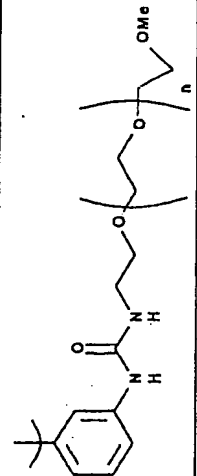


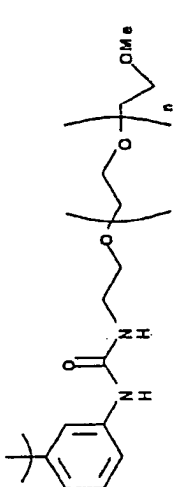
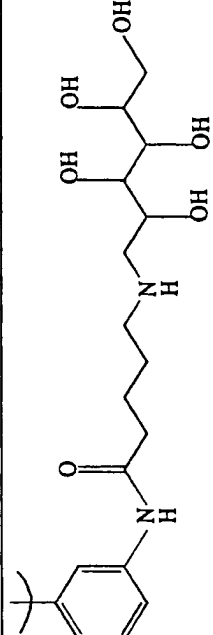
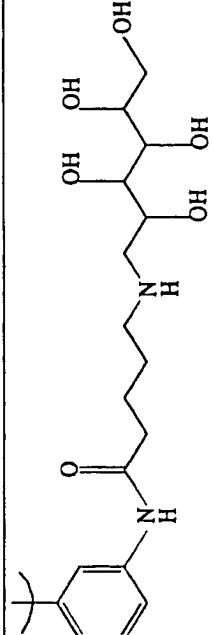
1596	エチル	n-ブチル	OH	H	
1597	n-ブチル	エチル	OH	H	
1598	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1599	エチル	n-ブチル	OH	H	

1600	n-ブチル	エチル	OH	H	
1601	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1602	エチル	n-ブチル	OH	H	
1603	n-ブチル	エチル	OH	H	

1604	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1605	エチル	n-ブチル	OH	H	
1606	n-ブチル	エチル	OH	H	
1607	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	

1608	エチル	n-ブチル	OH	H	
1609	n-ブチル	エチル	OH	H	
1610	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1611	エチル	n-ブチル	OH	H	

1612	n-ブチル	エチル	OH	H	<div data-bbox="341 997 365 1029" style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">21</div> 
1613	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1614	エチル	n-ブチル	OH	H	<div data-bbox="852 304 893 609" style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">n=0 または 正の整数</div> 
1615	n-ブチル	エチル	OH	H	<div data-bbox="1079 304 1120 609" style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">n=0 または 正の整数</div> 

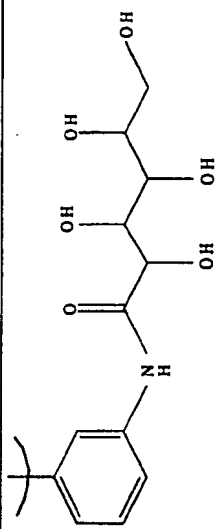
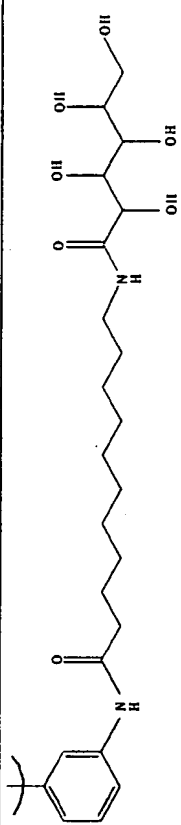
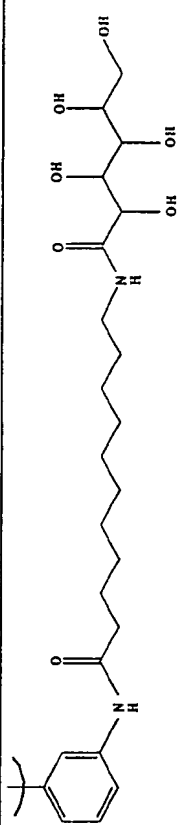
1616	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="margin-right: 10px;">JZ</div> <div>  </div> <div style="margin-left: 10px;"> <math>n=0</math> または 正の整数         </div> </div>
1617	エチル	n-ブチル	OH	H	
1618	n-ブチル	エチル	OH	H	

J2

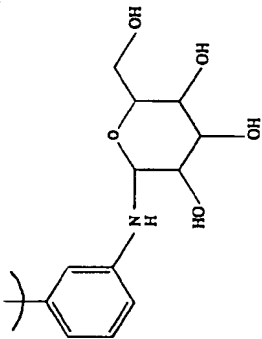
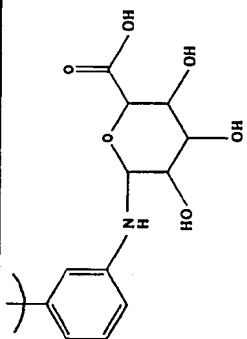
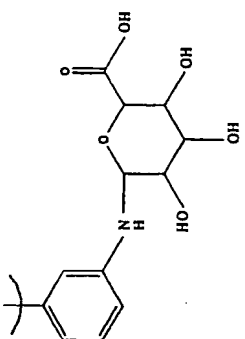
1619	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1620	エチル	n-ブチル	OH	H	
1621	n-ブチル	エチル	OH	H	

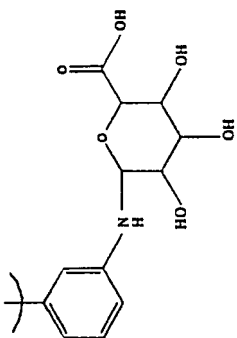
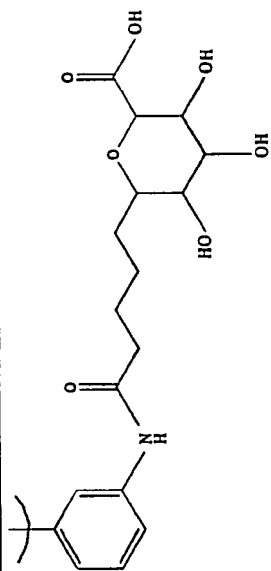
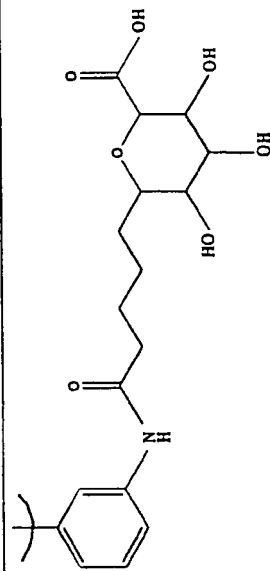
1622	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1623	エチル	n-ブチル	OH	H	
1624	n-ブチル	エチル	OH	H	



1625	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1626	エチル	n-ブチル	OH	H	
1627	n-ブチル	エチル	OH	H	

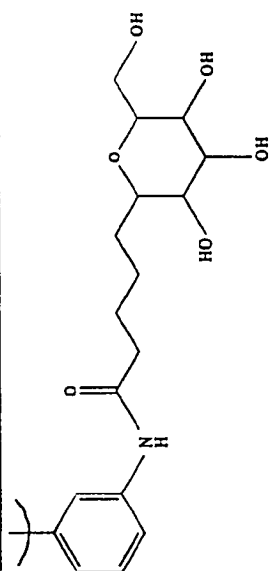
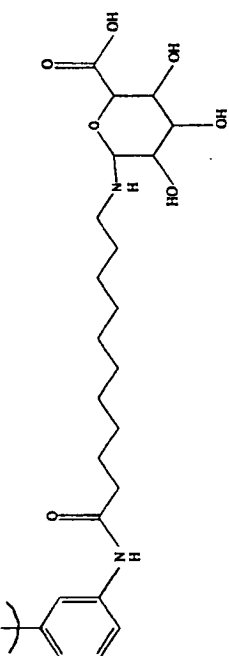
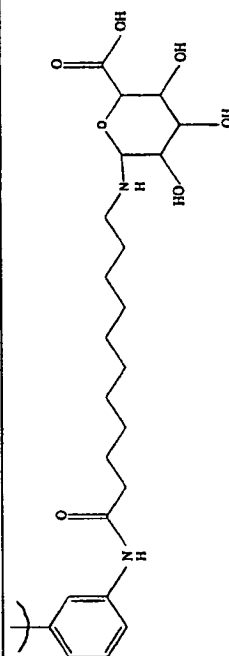
1628		n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1629		エチル	n-ブチル	OH	H	
1630		n-ブチル	エチル	OH	H	

1631	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1632	エチル	n-ブチル	OH	H	
1633	n-ブチル	エチル	OH	H	

1634	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1635	エチル	n-ブチル	OH	H	
1636	n-ブチル	エチル	OH	H	

59

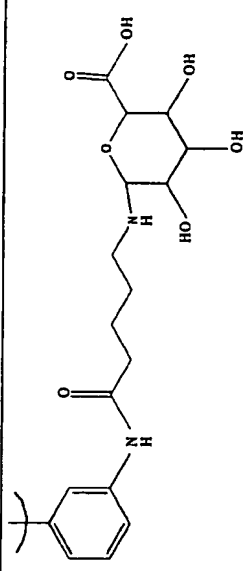
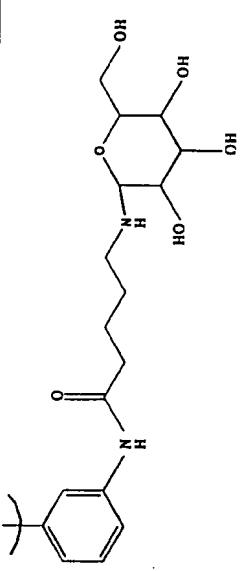
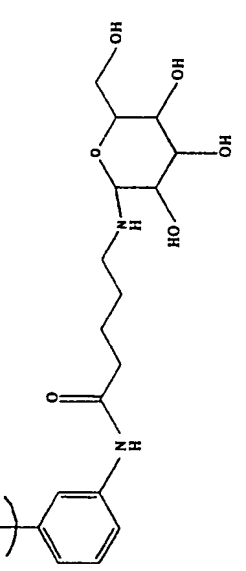
1637	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1638	エチル	n-ブチル	OH	H	
1639	n-ブチル	エチル	OH	H	

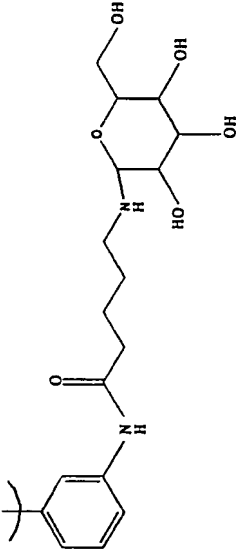
1640	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1641	エチル	n-ブチル	OH	H	
1642	n-ブチル	エチル	OH	H	

1643	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1644	エチル	n-ブチル	OH	H	
1645	n-ブチル	エチル	OH	H	

1646	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1647	エチル	n-ブチル	OH	H	
1648	n-ブチル	エチル	OH	H	



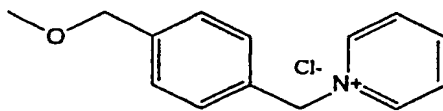
1649	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
1650	エチル	n-ブチル	OH	H	
1651	n-ブチル	エチル	OH	H	

1652	n-ブチル	n-ブチル	OH	H	
------	-------	-------	----	---	--

【0139】

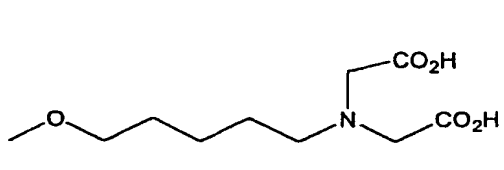
対象となる別の化合物群は、式Iの化合物からなる(式中、 $R^1$  および  $R^2$  はアルキル、好ましくはn-ブチルであり； $R^3$  はヒドロキシであり； $R^4$  および  $R^6$  は水素であり； $R^N$  は水素であり； $R^X$  ラジカルは、アミノ、ジメチルアミノおよびメトキシからなる群より選択され；かつ  $R^5$  は、下記の群の一つであって、p-またはm位が置換されたフェニルである。)

## 【化48】



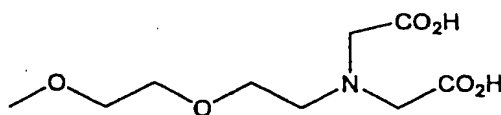
;

## 【化49】



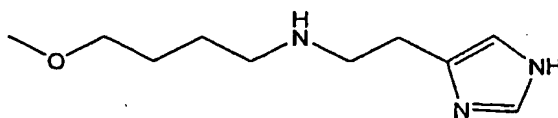
;

## 【化50】



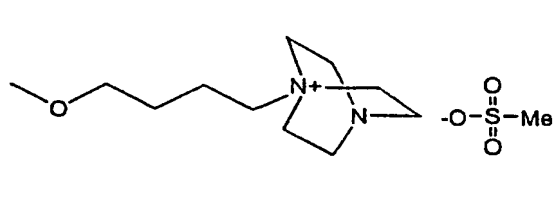
;

## 【化51】



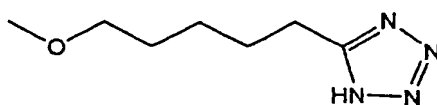
;

【化 5 2】



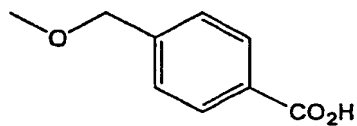
;

【化 5 3】



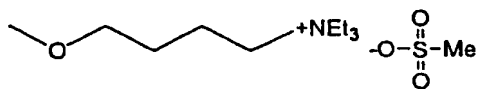
;

【化 5 4】



;

【化 5 5】



;

【化 5 6】

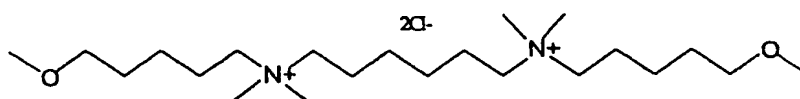
(361)

特表 2002-536440



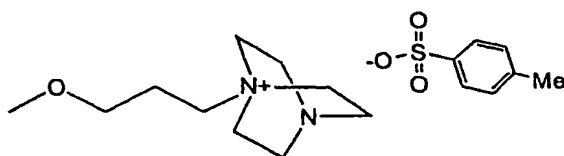
;

【化 5 7】



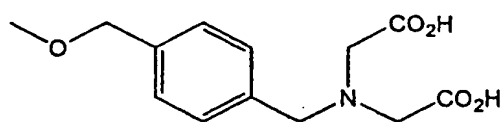
;

【化 5 8】



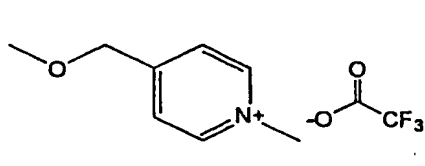
;

【化 5 9】



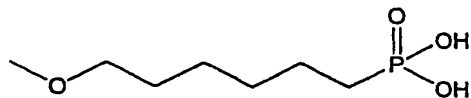
;

【化 6 0】



;

【化 6 1】



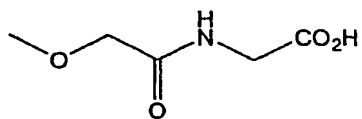
;

【化 6 2】



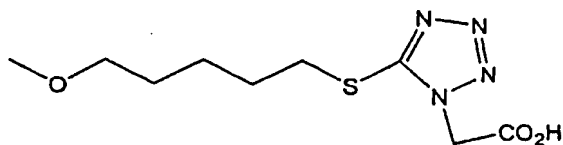
;

【化 6 3】



;

【化 6 4】

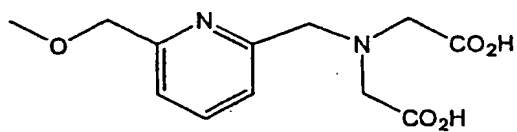


;

【化 6 5】

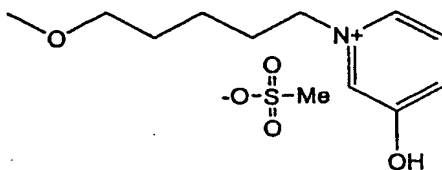
(363)

特表 2002-536440



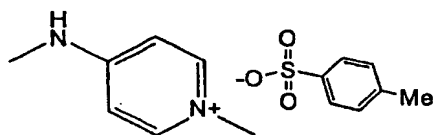
;

【化 6 6】



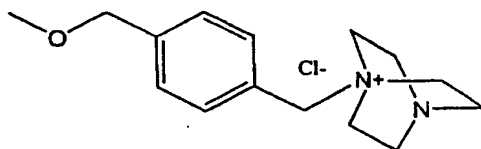
;

【化 6 7】



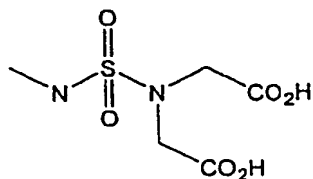
;

【化 6 8】



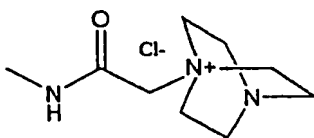
;

【化 6 9】



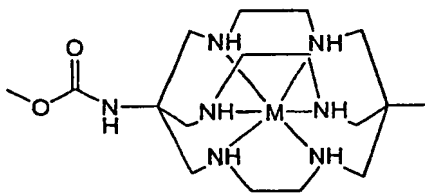
;

【化70】



; および

【化71】



式中、Mは、 $\text{Co}^{\text{II}}$ 、 $\text{Co}^{\text{III}}$ 、 $\text{Mn}^{\text{II}}$ 、 $\text{Mn}^{\text{III}}$ 、 $\text{Fe}^{\text{II}}$ 、 $\text{Fe}^{\text{III}}$ 、 $\text{Ni}^{\text{II}}$ 、 $\text{Ni}^{\text{III}}$ 、 $\text{Cr}^{\text{III}}$ 、 $\text{Cu}^{\text{II}}$ 、 $\text{Zn}^{\text{II}}$ 、 $\text{Cd}^{\text{II}}$ 、 $\text{Ga}^{\text{III}}$ 、 $\text{In}^{\text{III}}$ 、 $\text{V}^{\text{IV}}$ 、 $\text{Ru}^{\text{II}}$ 、 $\text{Pt}^{\text{IV}}$ 、 $\text{Rh}^{\text{III}}$ 、および $\text{Ir}^{\text{III}}$ からなる群より選択される。)

【0140】

#### 用量、製剤、および投与経路

本発明の回腸胆汁酸輸送阻害剤化合物は、高脂血症の疾患、病態および／または障害を予防および／または治療するために、これらの化合物と体内の作用部位、例えばヒトのような哺乳類の回腸とが接触するようないずれかの手段で、好ましくは経口で投与することができる。

【0141】



前述の疾患、病態および／または障害を予防および／または治療するために、本発明の化合物を、それ自身化合物として使用することができる。薬学的に許容される塩が、それらの親化合物よりも水への溶解度が大きいために、医学的用途に特に適している。このような塩類は、薬学的に許容される陰イオンまたは陽イオンを含む。本発明の化合物の薬学的に許容される適切な酸付加塩として適しているのは、無機酸、例えば塩酸、臭化水素酸、リン酸、メタリン酸、硝酸、スルホン酸および硫酸、ならびに有機酸、例えば酢酸、ベンゼンスルホン酸、安息香酸、クエン酸、エタンスルホン酸、フマル酸、グルコン酸、グリコール酸、イソチオン酸、乳酸、ラクトビオン酸、マレイン酸、リンゴ酸、メタンスルホン酸、コハク酸、トルエンスルホン酸、酒石酸、およびトリフルオロ酢酸などの塩を含む。医学的用途には、塩酸塩が特に好ましい。適当な薬学的に許容される塩基性塩は、アンモニウム塩、アルカリ金属塩、例えばナトリウムおよびカリウム塩、並びにアルカリ土類金属塩、例えばマグネシウムおよびカルシウム塩を含む。

#### 【0142】

本発明の定義A<sup>-</sup>の陰イオンは、例えば前述の一覧から選択される陰イオンのような、薬学的に許容される陰イオンである。

#### 【0143】

本発明の化合物は、更に許容できる担体、希釈剤、賦形剤、アジュバントなどの追加成分(本明細書においては集合的に「担体物質」と称する)も含有する薬学的組成物の形状で投与することができる。許容できる担体物質は、該組成物の他の成分と相溶性があり、かつレシピエントに悪影響を及ぼさない。担体物質は、固体もしくは液体、またはそれら両方であることができ、好ましくは有効成分を重量にして0.05~95%で含有することができる錠剤またはカプセル剤のような単位用量組成物として該化合物と製剤される。本発明の他の化合物を含む、その他の薬学的有効物質も存在することができる。本発明の薬学的組成物は、本質的に該成分の混合を含む、周知の調剤技術のいずれかにより調製することができる。

#### 【0144】

これらの化合物は、単剤療法における個別の治療化合物としてまたは併用療法における治療化合物との組合せとしてのいずれかで、医薬品との併用における使

用に利用可能ないずれか通常の手段で投与することができる。

#### 【0145】

望ましい生物学的作用を達成するのに必要な化合物の量は、選択された特異的化合物、意図された用途、投与方式、およびレシピエントの臨床状態などの多くの要因によって決まる。

#### 【0146】

概して、一日量は、約0.3～約100mg/kg体重/日であり、好ましくは約1mg～約50mg/kg体重/日、およびより好ましくは約3～約10mg/kg体重/日である。この総一日量は、単回用量で、または比例配分した反復投与分割量で患者に投与することができる。分割量は、1日に2～6回投与される。用量は、望ましい結果を得るのに有効なように、持続放出され得る。

#### 【0147】

経口投与可能な単位用量製剤、例えば錠剤またはカプセル剤は、例えばベンゾチアゼピン化合物を約0.1～約100mg、好ましくは化合物を約1～約75mg、より好ましくは化合物を約10～約50mg含有することができる。薬学的に許容される塩の場合、質量は、その塩に由来したベンゾチアゼピンのイオンの質量に関して記されている。

#### 【0148】

本発明の回腸胆汁酸輸送阻害剤の経口送達は、いくつかの機構による、薬物の胃腸管への長期または持続送達を提供するための、当技術分野において周知のもののような、製剤を含むことができる。これらは、小腸のpHの変化を基にした剤形からのpH感受性の放出、錠剤またはカプセル剤の緩徐な崩壊、製剤の物理特性を基にした胃における停留、腸管の粘膜内層への剤形の生体接着、または有効成分の剤形からの酵素による放出を含むが、これらに限定されるものではない。意図された作用は、剤形の操作により、有効薬物分子が作用部位(回腸)に送達される時間を延長することである。従って、腸溶性コーティングが施されたおよび腸溶性コーティングによる制御された放出の製剤は、本発明の範囲内である。適当な腸溶性コーティングは、酢酸フタル酸セルロース、ポリビニル酪酸フタレート、ヒドロキシプロピルメチルセルロースフタレートならびにメタクリル酸およ

びメタクリル酸メチルエステルの陰イオン性ポリマーである。

#### 【0149】

静脈内投与される場合、用量は例えば、約0.1mg/kg体重～約1.0mg/kg体重、好ましくは約0.25mg/kg体重～約0.75mg/kg体重、およびより好ましくは約0.4mg/kg体重～約0.6mg/kg体重の範囲である。この用量は、1分間当たり約10ng/kg体重～約100ng/kg体重の点滴により、都合よく投与することができる。この目的に適した点滴液は、例えば、1ml当たり約0.1ng～約10mg、好ましくは約1ng～約10mg含有することができる。単位用量は、例えば本発明の化合物を約1mg～約10mg含有する。従って、注射用アンプルは、例えば約1mg～約100mg含有することができる。

#### 【0150】

本発明の薬学的組成物は、経口、経直腸、局所、口内(例えば舌下)、および非経口(例えば、皮下、筋肉内、皮内または静脈内)投与に適しているが、ある一定の場合に最も適した経路は、治療される病態の性質および重症度、ならびに使用される具体的な化合物の性質に応じて決まるであろう。ほとんどの場合、好ましい投与経路は経口である。

#### 【0151】

経口投与に適した薬学的組成物は、個別の単位で提供され得、各々が少なくとも1種の本発明の化合物を予め定められた量を含んでいるような、カプセル剤、カシエ剤、トローチ剤または錠剤として；散剤または顆粒剤として；水性または非水性液体中の液剤または懸濁剤として；または、水中油もしくは油中水型乳剤として提供される。このような組成物は、示したように、有効化合物(複数)および担体物質(1種もしくはそれ以上の付属成分を構成)の会合を提供する工程を含む、適当な調剤法のいずれかにより調製される。概して、組成物は、有効化合物を液体もしくは細かく分割された固形担体物質と、またはそれら両方と均質かつ完全に混合し、その後必要ならば生成物を成型することにより調製される。例えば錠剤は、該化合物の散剤または顆粒剤を、任意に1種またはそれ以上の付属成分と共に、圧縮または成型することにより調製することができる。圧縮錠剤は、適当な機械での、任意に結合剤、滑沢剤、不活性希釈剤および/または界面活

性剤／分散剤と混合した、散剤または顆粒剤のような自在に流動する形状の該化合物の圧縮により調製することができる。成型錠剤は、適当な機械における、不活性液体希釈剤で湿らせた粉末化された化合物の成型により製造することができる。

#### 【0152】

口内(舌下)投与に適した薬学的組成物は、通常ショ糖およびアラビアゴムまたはトラガcantゴムである香味基剤中に、本発明の化合物を含有するトローチ剤、およびゼラチンおよびグリセリンまたはショ糖およびアラビアゴムのような不活性基剤中に化合物を含有する香錠を含む。

#### 【0153】

非経口投与に適した薬学的組成物は、通常本発明の化合物の滅菌水調製物を含有する。これらの調製物は、好ましくは静脈内投与されるが、皮下、筋肉内または皮内注射による投与も有効である。このような調製物は、都合が良いことに該化合物を水と混合し、かつ得られる溶液を滅菌し血液と等張とすることにより調製される。本発明の注射可能な組成物は、一般に本明細書に明らかにされた化合物を0.1～5 (w/w) %含有する。

#### 【0154】

経直腸投与に適した薬学的組成物は、好ましくは単位剤形座剤として提供される。これらは、本発明の化合物を1種以上の常用の固形担体物質、例えば、ココア、バターなどと混合し、その後得られた混合物を成型することにより調製することができる。

#### 【0155】

皮膚への局所塗布に適した薬学的組成物は、好ましくは軟膏剤、クリーム剤、ローション剤、パスタ剤、ゲル剤、スプレー剤、エアゾール剤または油の形状である。使用することができる担体物質は、ワセリン、ラノリン、ポリエチレングリコール、アルコールおよびこれらの2種以上の組合せである。有効化合物は、一般に、組成物の0.1～15 (w/w) %濃度、例えば0.5～2%で存在する。

#### 【0156】

経皮投与も可能である。経皮投与に適した薬学的組成物は、レシピエントの表

皮と長期間密な接触を維持するように適合された個別の貼布剤として提供することができる。このような貼布剤は、添加剤中に溶解および／または分散された、もしくはポリマー中に分散された、適当な緩衝した水溶液中に、本発明の化合物を適切に含有している。有効化合物の適切な濃度は、約1%~35%、好ましくは約3%~15%である。特に可能なものは、該化合物が、電子輸送またはイオン透過担体により貼布剤から送達されることであり、例えば、Pharmaceutical Research、3(6):318(1986)に記されている。

#### 【0157】

いずれの場合においても、投与される単回投与剤形を形成するために担体物質と組合わせることができる有効成分の量は、治療される宿主および具体的な投与様式に応じて変動するであろう。

#### 【0158】

前述のカプセル剤、錠剤、丸剤、散剤、および顆粒剤を含む経口投与のための固形剤形は、ショ糖、乳糖またはデンプンのような少なくとも1種の不活性希釈剤と混合された1種以上の本発明の化合物を含有することができる。このような剤形は、通常の実践として、不活性希釈剤以外の追加物質、例えばステアリン酸マグネシウムのような滑沢剤を含有することもできる。カプセル剤、錠剤および丸剤の場合、その剤形は、緩衝剤も含有することができる。錠剤および丸剤は更に腸溶性コーティングを伴い調製することができる。

#### 【0159】

経口投与用の液体剤形は、当技術分野において通常使用される不活性希釈剤、例えば水を含有している、薬学的に許容される乳剤、液剤、懸濁剤、シロップ剤、エリキシル剤を含むことができる。このような組成物は、湿潤剤、乳化および懸濁化剤、並びに甘味剤、香味剤、および香料のようなアジュバントを含むこともできる。

#### 【0160】

注射可能な調製物、例えば、滅菌注射水または油性懸濁液は、適当な分散または調整剤(setting agent)および懸濁化剤を用いて、公知の技術に従い製剤することができる。無菌の注射可能な調製物は、さらに例えば1,3-ブタンジオール溶

液のような、無毒の非経口で許容できる希釈剤または溶剤中の滅菌注射溶液または懸濁液であることもできる。使用することができる許容できる担体および溶剤は、水、リンガー液、および等張の塩化ナトリウム溶液である。加えて、滅菌した不揮発性油が、溶液または懸濁液の媒質として常用される。この目的のためには、合成のモノ-またはジ-グリセリドを含む、あらゆる銘柄の不揮発性油を使用することができる。加えて、オレイン酸のような脂肪酸が注射可能な調製物において使用されることがわかっている。

#### 【0161】

薬学的に許容される担体材料は、前述のものなどを全て包含している。

#### 【0162】

##### 治療様式

例えばアテローム硬化症のような高脂血症に関連する疾患、病態および／または障害を予防、軽減または緩和するため、もしくは高コレステロール血漿または血液レベルを予防または治療するための、本発明の化合物および／または組成物の投与様式は、様々な要因に応じて選択される。これらは、患者の型(type)、年齢、体重、性別、食事および医学的状态、疾患の重症度、投与経路、選択された具体的な化合物の有効性、効能、薬物動力学および毒性特性などの薬学的考慮、薬物送達システムが使用されるかどうか、並びに該化合物が併用薬の一部として投与されるかどうかを含む。従って、実際に使用される投与様式は、広範に変動し、それにより前述の好ましい投与様式とは異なることができる。

#### 【0163】

高脂血症状態に罹患した患者の最初の治療は、前記用量で開始することができる。治療は一般に、高脂血症疾患状態が制御されるかまたは消失するまで、数週間から数ヶ月または数年、必要な期間にわたって継続されるべきである。本明細書に開示された化合物または組成物で治療を受けている患者は、例えば、当技術分野において周知のいずれかの方法により血清コレステロールレベルを測定することにより、日常的にモニタリングし、治療効果を決定することができる。このようなデータの連続分析は、治療中の治療様式の変更を可能にし、その結果本発明の化合物の最適有効量が、期間内の時点で投与され、かつ治療期間が良好に決

定される。この方法で、治療様式／投与スケジュールは、治療の経過を通じて理論的に変更することができ、その結果満足できる効果を発揮する最低量の本発明の回腸胆汁酸輸送阻害剤が投与され、かつ投与は、高脂血症状態を十分治療するのに必要な期間のみ継続される。

#### 【0164】

下記の限定的でない実施例は、本発明の様々な局面を説明するために用いるものである。

#### 【0165】

##### 合成法の実施例

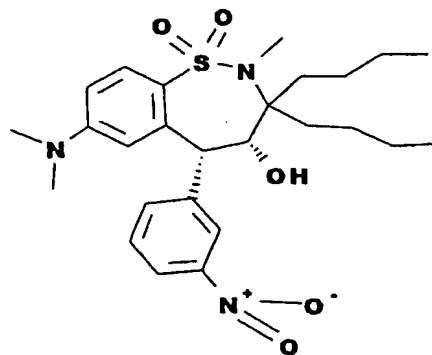
下記実施例の化合物、さらには本発明の他の化合物の調製に使用した出発材料は、市販のものであるか、もしくは当業者に公知の常法または当技術分野において説明された常法に類似の方法により調製することができる。下記実施例の出発材料は、特に記さない限りは商業的供給業者から得た。下記で使用したエチル2-アミノ-2-ブチルヘキサノエート塩酸塩は、Storkの文献と類似の方法で調製した(J. Org. Chem. 41:3491(1916))。

#### 【0166】

##### 実施例1

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール,1,1-ジオキシド

#### 【化72】



## 【0167】

工程1. 2-アミノ-2-ブチルヘキサノール

## 【化73】



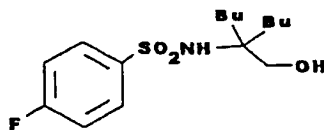
## 【0168】

テトラヒドロフラン100mLを溶媒とするエチル 2-アミノ-2-ブチルヘキサノエート塩酸塩29.75g(0.12mol)の溶液を、-20℃に冷却し、テトラヒドロフランを溶媒とする水素化リチウムアルミニウムの1.0M溶液を148.8ml添加しながら、温度を-15℃以下に維持した。反応混合液を、-20℃で1時間攪拌した後、室温まで温め、16時間攪拌した。その後反応混合液を、-20℃に冷却し、水6mLを添加し、その後3.75M水酸化ナトリウム水溶液5.6mLおよび水16mLを添加した。反応混合液を、1時間攪拌し、かつ室温に温めた。得られるスラリーを濾過し、かつ酢酸エチル100mLで洗浄した。酢酸エチル溶液を、水(2x200mL)で、その後塩水(300mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮した。得られる黄色油状物を、テトラヒドロフラン300mLに溶解し、かつ濃縮し、油状物として2-アミノ-2-ブチルヘキサノール20.61gを得た。

## 【0169】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-フルオロベンゼンスルホンアミド

## 【化74】



## 【0170】

テトラヒドロフラン150mLを溶媒とする4-フルオロベンゼンスルホンクロリ

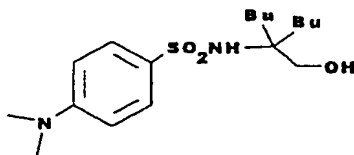


ド16.95g(0.09mol)の溶液に、トリエチルアミン36.4mLを添加した。反応混合液を、0℃に冷却し、テトラヒドロフラン70mLを溶媒とする2-アミノ2-ブチルヘキサノール(上記工程1において調製)溶液19.61gを添加した。反応混合液は、0℃で30分間、その後室温に16時間攪拌した。反応混合液を濃縮し、その後残留物を、酢酸エチル250mL中に溶解した。この酢酸エチル溶液を、水(2 x 200mL)および塩水(300mL)で洗浄した。酢酸エチル相を硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、油状物としてN-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-フルオロベンゼンスルホンアミド29.47gを得た。

【0171】

工程3. N-(1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル)-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミド

【化75】



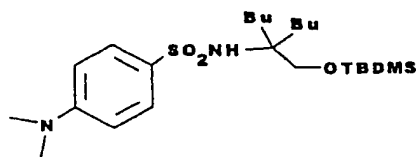
【0172】

前記工程2において調製された油状物28.89g(0.09mol)含有する溶液、テトラヒドロフランを溶媒とする2.0Mジメチルアミン872mL、および希釈していないジメチルアミン100mLを調製し、ポンベに入れた。この反応混合液を、110℃で16時間加熱し、冷却し、その後濃縮し、固形物としてN-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミド25.46gを得た。

【0173】

工程4. N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミド

【化76】



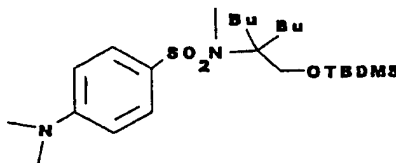
## 【0174】

ジメチルホルムアミド158mLを溶媒とするt-ブチルジメチルシリルクロリド15.51g(0.10mol)溶液に、工程3で調製した固形物を24.46g(0.07mol)、その後イミダゾール14.01gを添加した。反応混合液を3日間攪拌し、その後酢酸エチル1Lおよび水500mLで希釈した。酢酸エチル溶液を、5%塩酸溶液(2 x 200mL)、水(200ml)およびその後塩水(200ml)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウムで乾燥し、濃縮し、油状物とした。油状物を、ヘキサンで攪拌し、かつ得られた固形物は濾過し、白色固形物として、N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミド25.31gを得た。

## 【0175】

工程5. N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化77】



## 【0176】

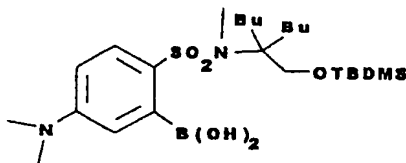
テトラヒドロフラン43mL中の鉱油中に分散された60%水素化ナトリウム0.476g(11.90mmol)の溶液に、工程4で調製した固形物4.0g(8.50mmol)を添加し、その後硫酸ジメチル1.6mLを滴下した。反応混合液を、還流温度で1時間加熱し、0°Cに

冷却し、その後水を添加した。反応混合液を濃縮し、酢酸エチル250mlおよび水250mlを添加した。これらの相を分離し、かつ酢酸エチル溶液を、1M塩酸(2 x 200 mL)で洗浄し、飽和炭酸水素ナトリウム(2 x 200mL)、水(200mL)、その後塩水(200ml)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物4.63gを得た。残留物を、15%酢酸エチル／ヘキサンを溶離液とするフラッシュクロマトグラフィーで精製し、油状物として、N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-N-メチルベンゼンスルホンアミド3.35gを得た。

## 【0177】

工程6.

## 【化78】



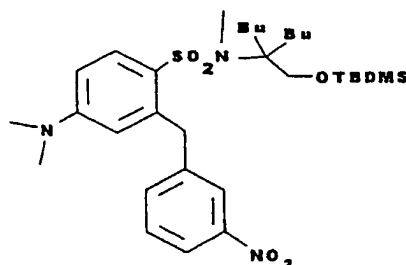
## 【0178】

0°Cに冷却したテトラヒドロフラン35mLを溶媒とする工程5で調製した油状物3.35g(6.90mmol)の溶液に、ヘキサン中の1.6M n-ブチルリチウム9.66mLを滴下した。反応混合液を0°Cで30分間攪拌し、室温に温め、1時間攪拌した。反応混合液に、5%塩酸6.5mLを添加し、その後テトラヒドロフランを蒸発させた。残留物に、ジクロロメタン200mLおよび水200mlを添加し、かつこれらの相を分離した。ジクロロメタン相を塩水(200mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、かつ濃縮し、黄色固形物3.12gを得た。

## 【0179】

工程7. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化79】



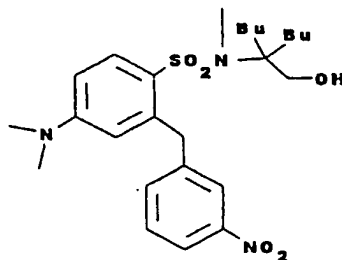
## 【0180】

トルエン10mLを溶媒とするテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)130mg(0.11mmol)に、3-臭化ニトロベンジル825mgを添加した。トルエン溶液を10分間攪拌した後、エタノール8mLを溶媒とする前記工程6で調製した固形物の脱気した溶液2.02g(3.82mmol)を添加し、引き続き1M炭酸ナトリウム10mLを添加した。反応混合液を、還流温度で45分間加熱し、その後冷却し、濃縮した。残留物に、酢酸エチル250mLを添加した。酢酸エチル混合液を、塩水(2 x 200mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物2.76gを得た。残留物に、ヘキサン中の30%酢酸エチル200mLを添加し、混合液を1.5時間攪拌し、その後シリカを通じて濾過した。酢酸エチル溶液を濃縮し、黄色固形物として、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド2.30gを得た。

## 【0181】

工程8. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化80】





-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド1.31gを得た。

### 【0185】

工程10. (4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1,1-ジオキシド

前記工程9で調製した油状物504mg (2.60mmol)のテトラヒドロフラン50mLを溶媒とする溶液を、0°Cに冷却し、テトラヒドロフランを溶媒とする1Mカリウムt-ブトキシド2.80mLを添加した。反応混合液を15分間攪拌し、水を添加し、その後、この混合液を濃縮し、残留物を得た。残留物を、酢酸エチル100mLに溶解した。酢酸エチル溶液を、水(100mL)および塩水(100mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、半固形物1.25gを得た。残留物を、酢酸エチルおよびヘキサンによる晶出により精製し、黄色結晶質固形物として、(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1,1-ジオキシド737.5mgを得た。

### <sup>1</sup>H NMR

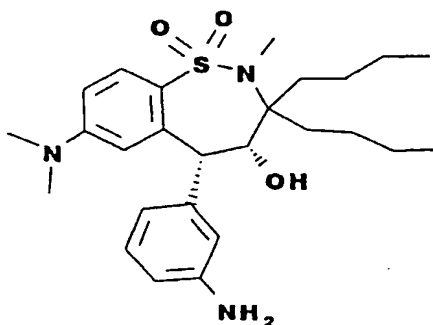
(CDCl<sub>3</sub>) δ 0.90-1.00 (m, 6H), 1.05-1.80 (m, 12H), 2.50-2.60 (m, 1H), 2.79 (s, 6H), 2.85 (s, 3H), 4.09 (d, *J* = 9.0 Hz, 1H), 5.76 (d, *J* = 2.0 Hz, 1H), 5.88 (s, 1H), 6.53 (dd, *J* = 2.4, 8.9 Hz, 1H), 7.59 (t, *J* = 7.9 Hz, 1H), 7.84-7.88 (m, 2H), 8.22 (dd, *J* = 1.0, 8.1 Hz, 1H), 8.47 (s, 1H). MS (M+H<sup>+</sup>) 504.

### 【0186】

#### 実施例2

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1,1-ジオキシド

### 【化82】



## 【0187】

実施例1の工程10で調製された固形物の737mg (1.46mmol)の溶液を、3 oz. Fisher/Porter容器内のエタノール110mLに溶解し、かつ10%Pd/C触媒約150mgを添加した。この混合液を、40psi H<sub>2</sub>で20時間水素添加し、その後濾過した。濾液を濃縮し、半固形物質0.82gを得た。この半固形物質を、酢酸エチルおよびヘキサンで晶出し、無色の結晶として、(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド0.51gを得た。

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 0.89

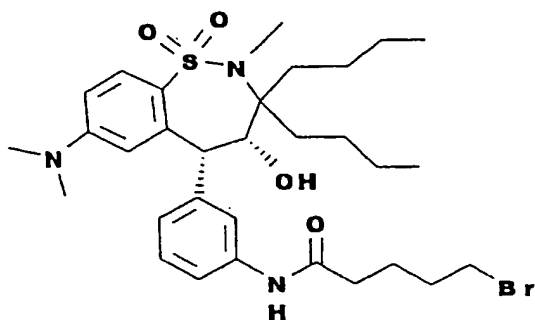
(t, J = 6.6 Hz, 3H), 0.92 (t, J = 7.2 Hz, 3H), 1.10-1.45 (m, 8H), 1.60-1.75 (m, 3H), 1.98-2.10 (m, 1H), 2.48-2.58 (m, 1H), 2.79 (s, 6H), 2.81 (s, 3H), 3.69 (s, 2H), 4.12 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 5.62 (s, 1H), 6.07 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.46 (dd, J = 2.4, 8.7 Hz, 1H), 6.61 (br d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.80 (br s, 1H), 6.89 (br d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.15 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 8.7 Hz, 1H). MS (M+H<sup>+</sup>) 474.

## 【0188】

実施例3

5-ブromo-N-[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ペンタンアミド

## 【化83】



## 【0189】

前記実施例2で調製した固形物の0.25g (0.53mmol) のテトラヒドロフラン3mLを溶媒とする溶液に、トリエチルアミン153 $\mu$ L、その後、5-ブロモバレリルクロリド86 $\mu$ Lを添加した。反応混合液を1時間攪拌し、その後濃縮し、残留物を形成した。残留物に水(50mL)を添加した。水溶液を、酢酸エチル(2 x 50mL)で抽出した。一緒にした酢酸エチル相を、5%塩酸(2 x 25mL)、飽和炭酸水素ナトリウム溶液(2 x 25mL)および塩水(25mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、固形物0.29gを得た。固形物を、酢酸エチルおよびヘキサンによる晶出で精製し、黄褐色固形物として、5-ブロモ-N-[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ペンタンアミド202.3mgを得た。

$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.88 (t,  $J = 7.2$  Hz, 3H), 0.92 (t,  $J = 6.9$  Hz, 3H), 1.20-1.42 (m, 8H), 1.57-2.10 (m, 8H), 2.37 (t,  $J = 6.9$  Hz, 2H), 2.46-2.57 (m, 1H), 2.78 (s, 6H), 2.81 (m, 3H), 3.41 (t,  $J = 6.3$  Hz, 2H), 4.10 (d,  $J = 8.5$  Hz, 1H), 5.69 (s, 1H), 5.97 (s, 1H), 6.47 (dd,  $J = 2.4, 8.9$  Hz, 1H), 7.24-7.40 (m, 4H), 7.76 (br s, 1H), 7.80 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H). MS ( $\text{M} + \text{H}^+$ ) 636, 638.

## 【0190】

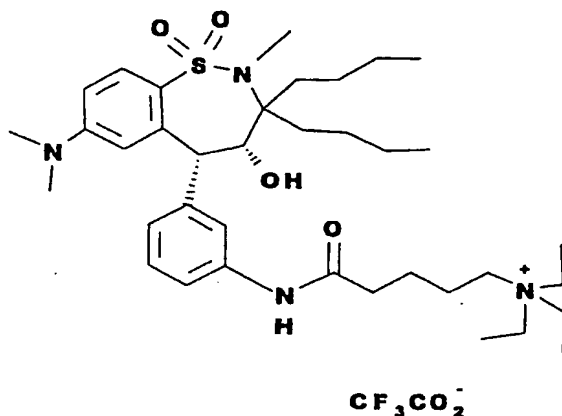
## 実施例4

5-[[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]ア



ミノ]-N,N,N-トリエチル-5-オキソ-ペンタンアミニウムトリフルオロ酢酸

【化84】



【0191】

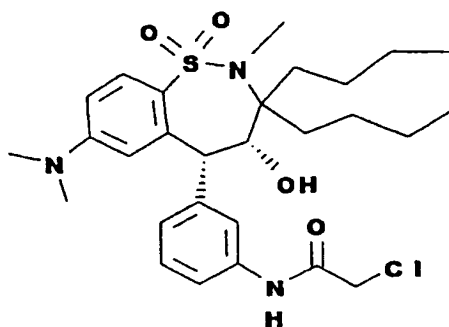
前記実施例3で調製した固形物100mg (0.16mmol) のアセトニトリル1mL中の溶液に、トリエチルアミン87 $\mu$ Lを添加した。反応混合液を、55℃で28時間、その後75℃で16時間加熱した。反応混合液を濃縮し、残留物を生成した。残留物を、逆相高速液体クロマトグラフィーで精製し、白色固形物として、5-[[3-[(4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-5-オキソ-ペンタンアミニウムトリフルオロ酢酸16.2mgを得た。 $^1\text{H}$  NMRは、該生成物と一致した。MS( $\text{M}^+$ ) 657。

【0192】

#### 実施例5

2-クロロ-N-[3-[(4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アセトアミド

【化85】



## 【0193】

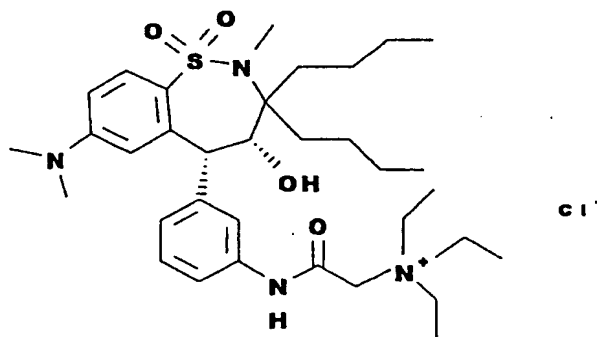
前記実施例4で調製した固形物100mg (0.21mmol) のテトラヒドロフラン2mLを溶媒とする溶液に、ブromo酢酸29mg、トリエチルアミン29 $\mu$ L、その後塩酸エチルジメチルアミノプロピルカルボジイミド40mgを添加した。反応混合液を16時間混合し、その後酢酸エチル50mLを添加した。酢酸エチル溶液を、水、5%塩酸(2 x 25mL)、飽和炭酸水素ナトリウム溶液(2 x 25mL)、その後塩水(25mL)で洗浄した。酢酸エチル相を硫酸マグネシウム上で乾燥し、その後濃縮し、油状物88mgを得た。油状物を、ヘキサン中の50%酢酸エチルを溶離液とするフラッシュクロマトグラフィーで精製し、*cis*-3,3-ジブチル-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-7-ジメチルアミノ-5-(3(2-クロロアセトアミド)フェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン72.0mgを得、微量の2-クロロ-N-[3[(4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アセトアミドが存在した。<sup>1</sup>H NMRは、該生成物と一致した。MS (M+H<sup>+</sup>) 550。

## 【0194】

実施例6

2-[[3-[(4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-2-オミソエタンアミニウムクロリド

## 【化86】



## 【0195】

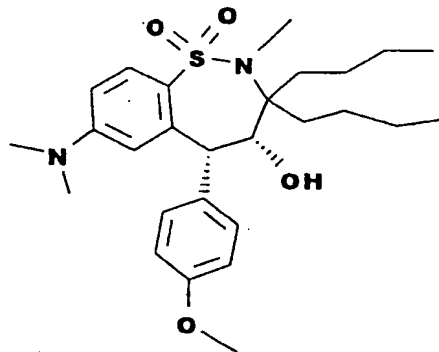
前記実施例5において調製した材料63mg (0.12mmol) のテトラヒドロフラン1ml 混合液に、トリエチルアミン64  $\mu$ Lを添加した。反応混合液を、還流温度で3日間加熱し、その後濃縮した。残留物をエーテルで磨砕し、黄褐色固形物の2-[[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-2-オミソエタンアミニウムクロリド66.5mgを得た。 $^1\text{H}$  NMRは、該生成物と一致した。MS ( $\text{M}^+$ ) 615。

## 【0196】

## 実施例7

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド

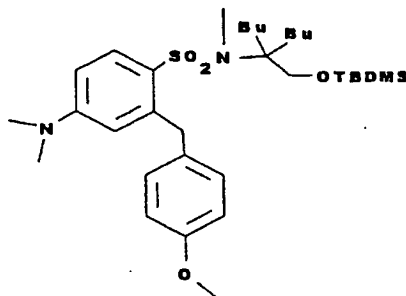
## 【化87】



## 【0197】

工程1. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化88】



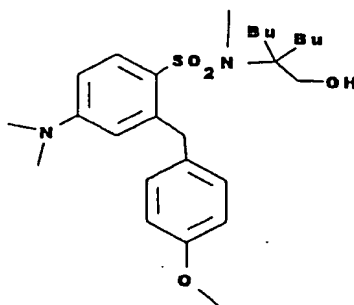
## 【0198】

前記実施例1工程5の材料1.00g (2.06mmol) のテトラヒドロフラン10mLを溶媒とする溶液を0℃に冷却し、ヘキサンを溶媒とする1.6M n-ブチルリチウム2mLを添加した。反応混合液を、0℃で1時間攪拌した。反応混合液に、ホウ酸トリメチル480μLを添加し、かつこの混合液を0℃で15分間、その後室温で1時間攪拌した。反応混合液を濃縮し、残留物を生成した。残留物を、トルエン20mLおよび2M炭酸ナトリウム水溶液2.1mLに溶解した。この混合液に、p-メトキシベンジルクロリド300μL、その後テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)71mgを添加した。反応混合液を100℃で16時間加熱し、冷却し、その後トルエン50mLを添加した。反応混合液を、水(50mL)および塩水(50mL)で洗浄し、シリカを通して濾過し、かつ濃縮し、残留物を生成した。この残留物を、フラッシュクロマトグラフィーで精製し、油状物として、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド0.82gを生成した。

## 【0199】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化89】



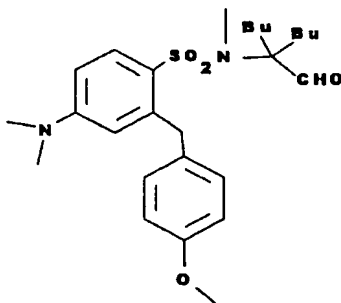
## 【0200】

N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに使用した以外は、前記実施例1工程8の方法に従った。

## 【0201】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

## 【化90】



## 【0202】

N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに使用した以外は、実施例1の工

程9の方法に従った。

【0203】

工程4. (4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに使用した以外は、実施例1工程10の方法に従った。

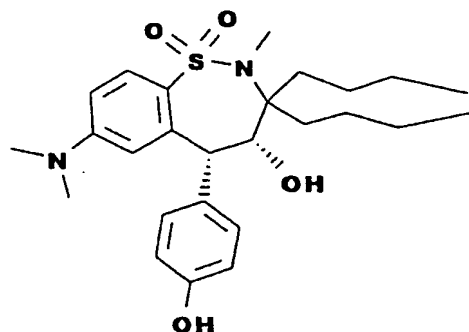
$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.83-0.96 (m, 6H), 1.15-1.38 (m, 6H), 1.69-1.83 (m, 4H), 2.00-2.08 (m, 1H), 2.55-2.59 (m, 1H), 2.81 (s, 6H), 2.83 (s, 3H), 3.84 (s, 3H), 4.10-4.16 (m, 1H), 5.70 (s, 1H), 5.99 (s, 1H), 6.52 (s, 1H), 6.93 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 7.43 (d,  $J = 8.4$  Hz, 2H), 7.83 (d,  $J = 8.6$  Hz).

【0204】

実施例8

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

【化91】



【0205】

前記実施例7工程4で調製した固形物0.52g (1.06mmol) のジクロロメタン10mLを溶媒とする溶液を $-78^\circ\text{C}$ に冷却し、三臭化ホウ素300  $\mu\text{L}$ を添加した。反応混合液を $-78^\circ\text{C}$ で1時間攪拌し、その後水100mLおよびジクロロメタン100mLを添加した。ジクロロメタン溶液を、10%炭酸ナトリウム水溶液(100ml)、10%塩酸(100mL)お

よび塩水(100mL)で洗浄した。ジクロロメタン相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、固形物として(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド0.46gを得た。

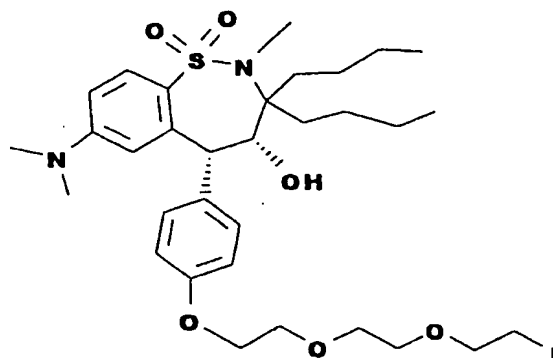
$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.82-0.97 (m, 6H), 1.15-1.40 (m, 6H), 1.67-1.76 (m, 4H), 2.00-2.10 (m, 1H), 2.51-2.59 (m, 1H), 2.83 (s, 6H), 2.84 (s, 9H), 4.12 (d,  $J=8.0$  Hz, 1H), 4.88 (br s, 1H), 5.69 (s, 1H), 6.07 (d,  $J=2.2$  Hz, 1H), 6.60 (dd,  $J=2.2, 8.6$  Hz, 1H), 6.88 (d,  $J=8.6$  Hz, 2H), 7.38 (d,  $J=8.3$  Hz, 2H), 7.85 (d,  $J=8.6$  Hz). HRMS (ES) 計算値:  $\text{C}_{26}\text{H}_{39}\text{N}_2\text{O}_4\text{S}$ : 475.2631. 実測値: 475.2649.

# 【0206】

## 実施例9

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-((2-ヨードエトキシ)エトキシ)エトキシ)フェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

## 【化92】



# 【0207】

実施例8で調製した固形物0.38g(0.80mmol)のジメチルホルムアミド8mL中の溶液に、95%水素化ナトリウム44mg、その後1, 2-ビス(2-ヨードエトキシ)エタン730 $\mu\text{L}$ を添加した。反応混合液を1時間攪拌した。この反応混合液に、水100mLおよび酢酸エチル100mLを添加し、かつ反応混合液を酢酸エチルで抽出した。酢酸エ

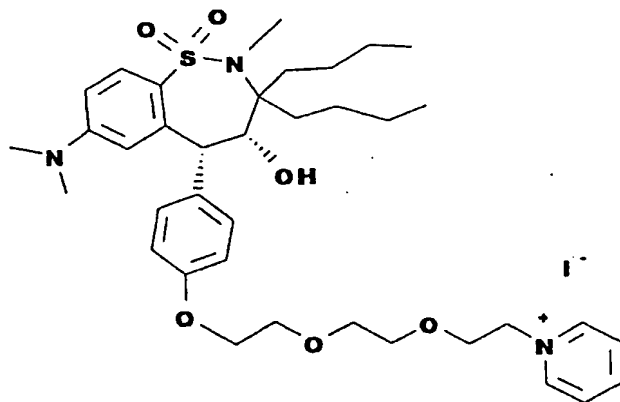
チル相を、塩水(100mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、かつ濃縮し、残留物を生成した。残留物を、ヘキサン中の10~25%酢酸エチルを溶離液として用いて、フラッシュクロマトグラフィーを行い精製し、固形物として、(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-((2-ヨードエトキシ)エトキシ)エトキシ)フェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル1, 1-ジオキシド0.37gを得た。HRMS (ES) 計算値:  $C_{32}H_{50}N_2O_6$  SI : 717.2434 : 実測値: 717.2419。 $^1H$  NMRは該生成物の構造と一致した。

### 【0208】

#### 実施例10

1-[2-[2-[2-[4-[(4R, SR)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]エチル]ピリジニウム

### 【化93】



### 【0209】

前記実施例9で調製した固形物75mgのピリジン5mLを溶媒とする溶液を、70℃で16時間加熱した。反応混合液を濃縮し、残留物を生成した。残留物をエーテルで磨砕し、固形物として1-[2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]エチル]ピリジニウム56.8mgを得た。



<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ

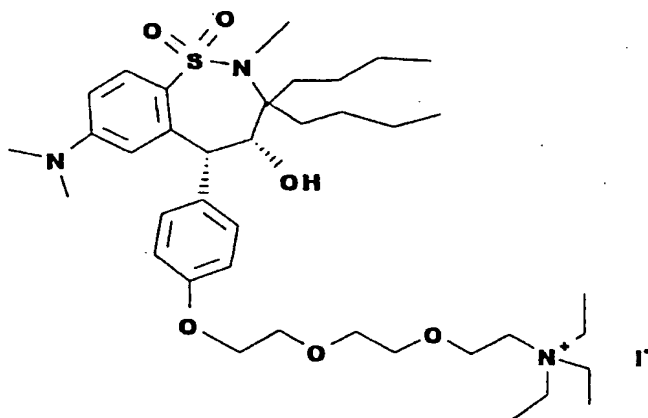
0.89-0.97 (m, 6H), 1.19-1.40 (m, 6H), 1.70-1.74 (m, 4H), 2.00-2.10 (m, 1H),  
 2.60-2.69 (m, 1H), 2.80 (s, 6H), 2.83 (s, 3H), 3.69-3.72 (m, 4H), 3.83-3.87 (m,  
 2H), 4.09-4.15 (m, 5H), 5.23-5.27 (m, 2H), 5.70 (s, 1H), 5.97 (d, *J* = 2.4 Hz,  
 1H), 6.50 (dd, *J* = 2.4, 8.8 Hz, 1H), 6.93 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H), 7.46 (d, *J* = 8.7  
 Hz, 2H), 7.83 (d, *J* = 8.7 Hz, 1H), 7.96-8.01 (m, 2H), 8.63-8.67 (m, 2H), 9.52  
 (d, *J* = 6.0 Hz, 1H). HRMS (ES) 計算値: C<sub>37</sub>H<sub>54</sub>N<sub>3</sub>O<sub>6</sub>S: 668.3733. 実測値:  
 668.3762.

【0210】

実施例11

2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ  
 -4-ヒドロキシ-2-メチル-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノ  
 キシ]エトキシ]エトキシ]-N, N, N-トリエチルエタンアミニウムヨージド

【化94】



【0211】

トリエチルアミンを、ピリジンの代わりに使用し、かつ90℃で6時間加熱した  
 以外は、実施例10の方法に従った。<sup>1</sup>H NMRは、望ましい生成物と一致した。

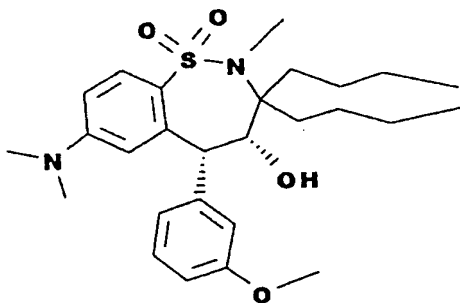
$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.90-0.97 (m, 6H),  
 1.12-1.45 (m, 15H), 1.60-1.73 (m, 4H), 2.09-2.11 (m, 1H), 2.52-2.55 (m, 1H),  
 2.82 (s, 6H), 2.83 (s, 3H), 3.06-3.15 (m, 2H), 3.53 (q,  $J = 7.2$  Hz, 6H), 3.74-  
 3.75 (m, 4H), 3.86-3.89 (m, 2H), 4.04-4.16 (m, 5H), 5.70 (s, 1H), 5.98 (m,  
 1H), 6.50 (d,  $J = 3.0$  Hz, 1H), 6.93 (d,  $J = 8.7$  Hz, 2H), 7.45 (d,  $J = 8.7$  Hz,  
 2H), 7.83 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H). HRMS (ES) 計算値:  $\text{C}_{38}\text{H}_{64}\text{N}_3\text{O}_6\text{S}$ : 690.4516.  
 実測値: 690.4548.

【0212】

#### 実施例12

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-メトキシフェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-オール 1, 1-ジオキシド

【化95】

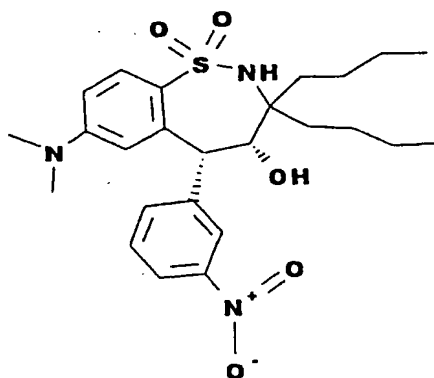


【0213】

3-メトキシベンジルクロリドを、3-ニトロベンジルクロリドと交換する以外は、前記実施例1の方法に従った。

$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.90-0.97 (m, 6H), 1.17-  
 1.38 (m, 8H), 1.69-1.73 (m, 2H), 2.04-2.08 (m, 1H), 2.55-2.62 (m, 1H), 2.81  
 (s, 6H), 2.84 (s, 3H), 3.82 (s, 3H), 4.15 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 5.72 (s, 1H), 6.01  
 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 6.50 (dd,  $J = 2.4, 8.4$  Hz, 1H), 6.86-6.89 (m, 1H), 7.05 (br  
 s, 1H), 7.13-7.16 (m, 1H), 7.32 (t,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.83 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H).  
 MS ( $\text{M}+\text{H}^+$ ) 489.

【化96】

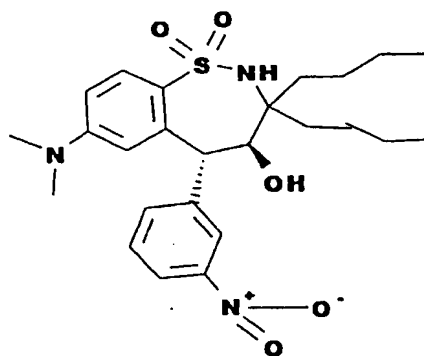


【0214】

実施例13

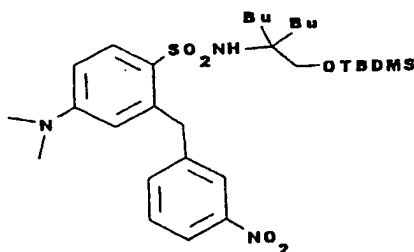
(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシドおよび(4S, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド

【化97】



【0215】

工程1. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド



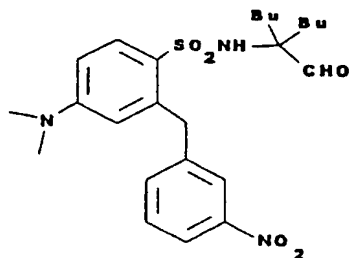
## 【0216】

前記実施例1工程4で調製した材料2.0g (4.25mmol) のテトラヒドロフラン10mLを溶媒とする溶液を0℃に冷却し、ヘキサンを溶媒とする1.6M n-ブチルリチウム8.0mLを添加した。反応混合液を、0℃で30分間加熱した。この反応混合液に、ホウ酸トリメチル1.9mLを添加し、かつこの混合液を0℃で10分間、その後、室温で1時間攪拌した。反応混合液に、水および塩酸5%を100mL添加し、溶液のpHを6~7にし、その後揮発分を蒸発させた。この水溶液に、酢酸エチル100mLを添加し、溶液を抽出した。酢酸エチル相を、水(100mL)および塩水(100mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物を生成した。残留物を、エタノール7mLに溶解し、窒素で脱気した。分液フラスコ中にテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 150mg、トルエン10mLおよび3-ニトロベンズアルデヒド918mgを入れた。このトルエン溶液に、エタノール溶液を添加し、その後1M炭酸ナトリウム水溶液10mLを添加した。この反応混合液を還流温度で1時間加熱し、室温に冷却し、かつその後16時間攪拌した。反応混合液を濃縮し、かつ酢酸エチル100mLに溶解した。酢酸エチル溶液を、水(100mL)および塩水(100mL)で洗浄した。酢酸エチル相を硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物を生成した。残留物を、フラッシュクロマトグラフィーで精製し、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド1.72gを得た。

## 【0217】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド

## 【化98】



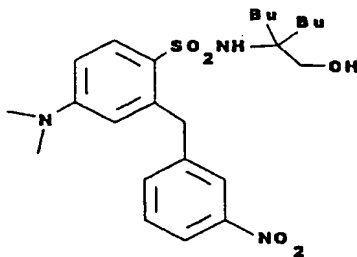
## 【0218】

N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドに代えた以外は、実施例1工程8の方法に従った。

## 【0219】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド

## 【化99】



## 【0220】

ジクロロメタン2mLを溶媒とするオキサリルクロリド79 $\mu$ Lの溶液を-78℃に冷却し、ジメチルスルホキシド107 $\mu$ Lを添加し、この混合液を20分間攪拌した。冷却した反応混合液に、ジクロロメタン2mLを溶媒とする前記工程2からのアルコール370mg(0.75mmol)の溶液を添加し、混合液を-78℃で1時間攪拌した。冷却した反応混合液に、ジイソプロピルエチルアミン660 $\mu$ Lを添加した。反応混合液を室温に温め、30分間攪拌した。反応混合液に、水100mLを添加し、混合液をジクロロメタン(2 x 50mL)で抽出した。一緒にしたジクロロメタン相を、塩水(50mL)で

洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、黄色油状物0.47gを得た。残留物を、ヘキサンを溶媒とする25%酢酸エチル25mLに溶解し、シリカを通して濾過し、濃縮した。残留物を、酢酸エチルおよびヘキサンで晶出し、黄色固形物として、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド301.6mgを得た。

#### 【0221】

工程4. (4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシドおよび(4S, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド

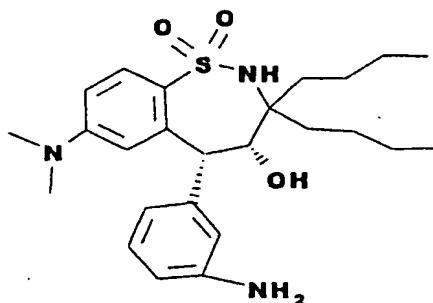
前記工程3で調製した材料150mg (0.31mmol) のテトラヒドロフラン6mLを溶媒とする溶液を、-15℃に冷却し、テトラヒドロフランを溶媒とする1Mカリウムt-ブトキシド0.90mLを添加した。反応混合液を-15℃で15分間攪拌し、その後水を添加した。有機物を蒸発し、酢酸エチル100mlを添加し、その後抽出した。酢酸エチル相を、塩水(100mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物を生成した。残留物を、ヘキサン中の30%酢酸エチルを溶離液として用いるフラッシュクロマトグラフィーで精製し、(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド61.8mgおよび(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド61.8mgを得た。<sup>1</sup>H NMRおよび質量スペクトルは、該生成物に一致した。

#### 【0222】

##### 実施例14

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド

#### 【化100】



## 【0223】

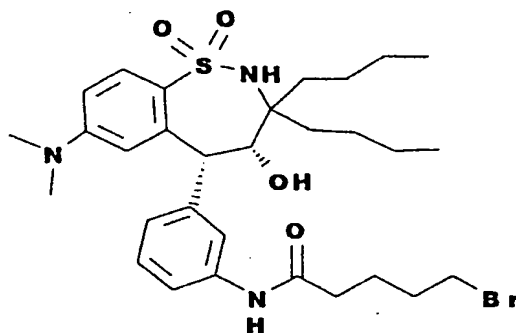
(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシドを、(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシドの代わりに使用した以外は、前記実施例2の方法に従った。<sup>1</sup>H NMRは、該生成物と一致した。MS (M<sup>+</sup>) 460。

## 【0224】

## 実施例15

5-ブromo-N-[3-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル)フェニル]ペンタンアミド

## 【化101】



## 【0225】

(4R, 5R)-5-(3-アミノフェニル)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシドを、(4R, 5R)-5-(3-

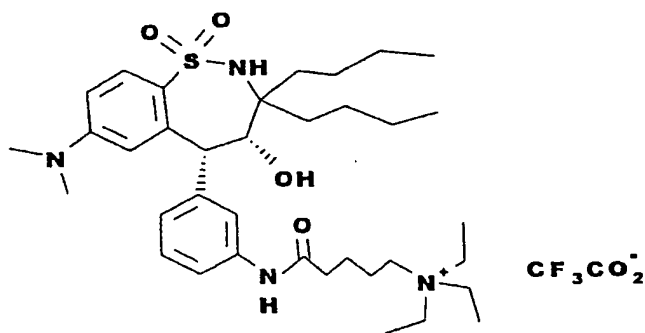
アミノフェニル)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシドの代わりに使用した以外は、前記実施例3の方法に従った。 $^1\text{H}$  NMRは、該生成物に一致した。MS ( $\text{M}+\text{H}^+$ ) 623。

### 【0226】

#### 実施例16

5-[[3-((4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-5-オキソ-1-ペンタンアミニウムトリフルオロ酢酸

### 【化102】



### 【0227】

テトラフルオロフラン1ml中の前記実施例15において調製した臭化物54.1mg(0.09mmol)の溶液に、トリエチルアミン48 $\mu\text{L}$ を添加した。この反応混合液を還流温度で3日間加熱した。溶媒を蒸発し、残留物をエーテルで磨砕した。固形物を、逆相高速液体クロマトグラフィーで精製し、白色固形物として、5-[[3-((4R,5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェニル]アミノ]-N,N,N-トリエチル-5-オキソ-1-ペンタンアミニウムトリフルオロ酢酸17.9mgを得た。 $^1\text{H}$  NMRは該生成物と一致した。MS ( $\text{M}^+$ ) 643。

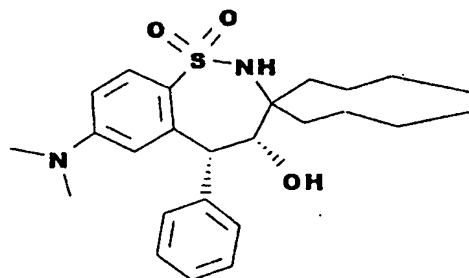
### 【0228】

#### 実施例17



(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-フェニル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド

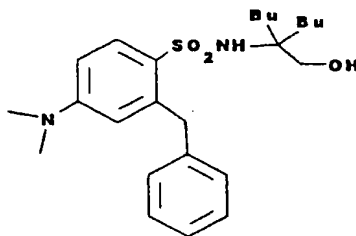
【化103】



【0229】

工程1-2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

【化104】



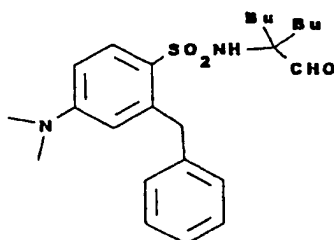
【0230】

N-[1-ブチル-1-[[[(1, 1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミドおよび塩化ベンジルを、N-[1-ブチル-1-[[[(1, 1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-N-メチルベンゼンスルホンアミドおよびp-メトキシベンジルクロリドの代わりに使用した以外は、実施例7工程1-2の方法に従った。

【0231】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

【化105】



## 【0232】

N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドの代わりに使用した以外は、実施例13工程3の方法に従った。

## 【0233】

工程4. (4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-フェニル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド

N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例7の工程4の方法に従った。

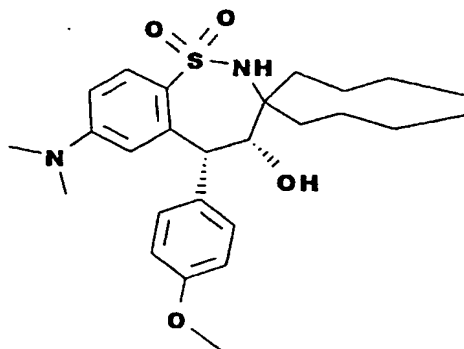
$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.9 (m, 6H), 1-1.7 (m, 13H), 2.3 (m, 1H), 2.8 (s, 6H), 4.0 (s, 2H), 5.5 (s, 1H), 5.9 (s, 1H), 6.5 (m, 1H), 7.4 (m, 3H), 7.5 (m, 2H), 7.8 (m, 1H). MS ( $\text{M}+\text{H}^+$ ) 445.0.

## 【0234】

実施例18

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-(4-メトキシフェニル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド

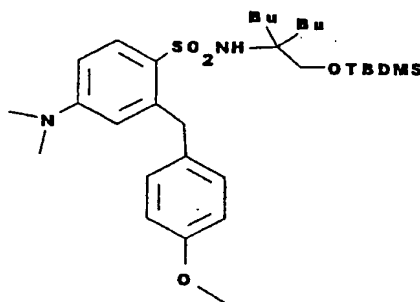
## 【化106】



## 【0235】

工程1. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド

## 【化107】



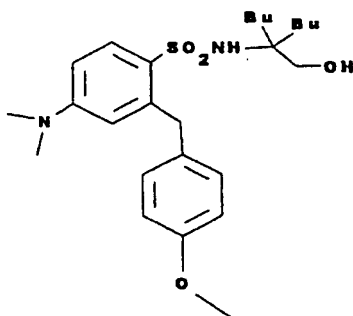
## 【0236】

N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例7の工程1の方法に従った。

## 【0237】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド

## 【化108】



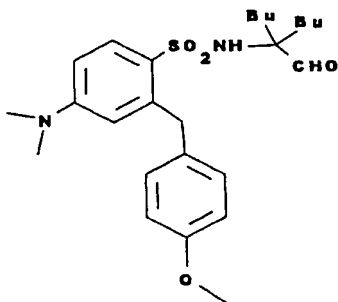
## 【0238】

N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例1工程8の方法を用いた。

## 【0239】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミド

## 【化109】



## 【0240】

N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドの代わりに、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドを用いた

以外は、実施例13の工程3の方法を用いた。

【0241】

工程4. (4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド

N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例1工程10の方法に従って行った。

<sup>1</sup>H

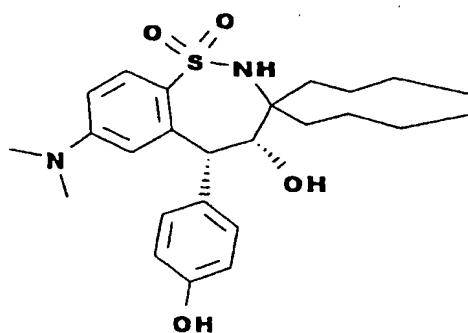
NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 0.89-1.00 (m, 6H), 1.06-1.73 (m, 11H), 2.36 (t, J = 9.5 Hz, 1H), 2.80 (s, 6H), 2.98 (s, 1H), 3.85 (s, 3H), 3.97 (s, 1H), 4.03 (d, J = 9.0 Hz, 1H), 5.47 (s, 1H), 6.00 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (dd, J = 2.6, 8.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 7.44 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 7.81 (d, J = 8.7 Hz, 1H).

【0242】

実施例19

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシド

【化110】



【0243】

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシドを、(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1, 1-ジオキシドと交換して行った。

)-2-メチル-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1,1-ジオキシドの代わりに用い、反応温度0°Cを用いた以外は、前記実施例8に記した方法に従った。

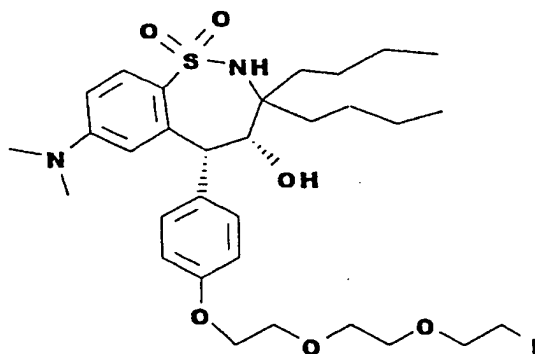
$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  0.86-0.97 (m, 6H), 1.15-1.75 (m, 11H), 2.35 (t,  $J = 9.9$  Hz, 1H), 2.80 (s, 6H), 3.98 (s, 1H), 4.02 (d,  $J = 8.6$  Hz, 1H), 5.12 (s, 1H), 5.45 (s, 1H), 5.98 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 6.48 (dd,  $J = 2.6, 8.6$  Hz, 1H), 6.88 (d,  $J = 8.8$  Hz, 2H), 7.38 (d,  $J = 8.1$  Hz, 2H), 7.80 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H).

【0244】

#### 実施例20

2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1,1-ジオキシド-1,2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N,N,N-トリエチルエタンアミニウムヨージド

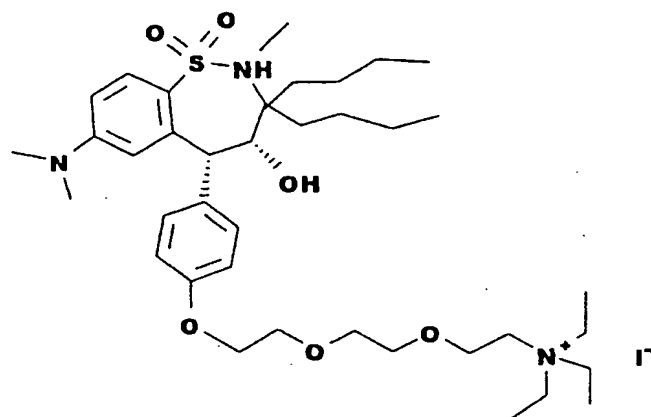
【化111】



【0245】

工程1

【化112】



## 【0246】

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-ヒドロキシフェニル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシドを、(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-(((2-ヨードエチルオキシ)エトキシ)エトキシ)フェニル)-2-メチル-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシドの代わりに用い、かつ95%水素化ナトリウム3.3当量を2.2当量の代わりに使用した以外は、前記実施例9に記した方法に従った。<sup>1</sup>H NMRは該生成物に一致した。

## 【0247】

工程2. 2-[2-[2-[4-[(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-4-ヒドロキシ-1, 1-ジオキシド-1, 2-ベンゾチアゼピン-5-イル]フェノキシ]エトキシ]エトキシ]-N, N, N-トリエチルエタンアミニウムヨージド

先の工程1で調製したベンゾチアゼピンを使用した以外は、実施例10に記した方法に従った。

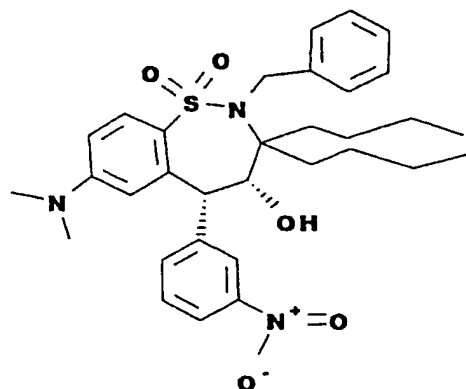
<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ

0.88-0.05 (m, 6H), 1.14-1.60 (m, 20H), 2.31-2.39 (m, 1H), 2.82 (s, 6H), 3.06-3.15 (m, 2H), 3.54 (q, *J*=7.3 Hz, 6H), 3.75-3.81 (m, 4H), 3.88-4.17 (m, 7H), 5.47 (s, 1H), 5.98-6.02 (m, 1H), 6.47-6.54 (m, 1H), 6.93-6.98 (m, 2H), 7.42-7.47 (m, 2H), 7.81-7.84 (m, 1H).

## 【0248】

## 実施例21

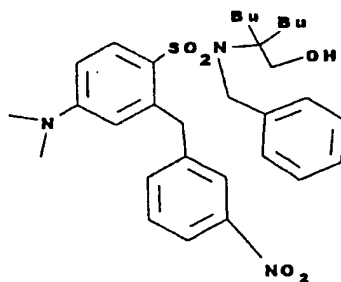
(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-2-(フェニルメチル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド  
【化113】



## 【0249】

工程1. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

## 【化114】



## 【0250】

実施例13工程1で調製したスルホンアミド4.24g(7.0mmol)のアセトン30mLを溶媒とする溶液に、炭酸カリウム2.90g、テトラ-n-ブチルアンモニウムヨード0.517g、その後臭化ベンジル2.394gを添加した。反応混合液を還流温度で5日間加熱した。反応混合液に、臭化ベンジル2.394g、テトラ-n-ブチルアンモニウムヨード0.517g、その後粉末化した炭酸カリウム2.90gを添加した。反応混合液を還流温度で1日加熱した。反応混合液250mLに、酢酸エチルを添加した。酢酸エチ

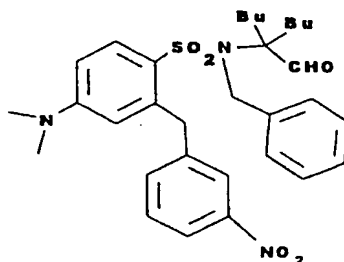


ル溶液を、水(3 x 100mL)および塩水(200mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物とした。この残留物を、フラッシュクロマトグラフィーで精製し、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド1.82gを得た。

### 【0251】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

### 【化115】



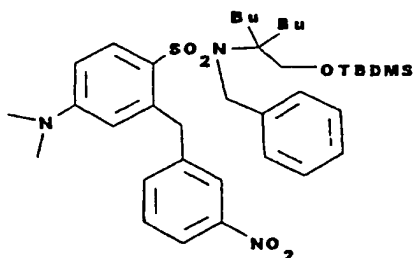
### 【0252】

N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)-メチル]-N-メチルベンゼンスルホアミドの代わりに使用した以外は、実施例1工程8の方法に従った。

### 【0253】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

### 【化116】



## 【0254】

N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]ベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例13工程3の方法に従った。

## 【0255】

工程4. (4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(3-ニトロフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

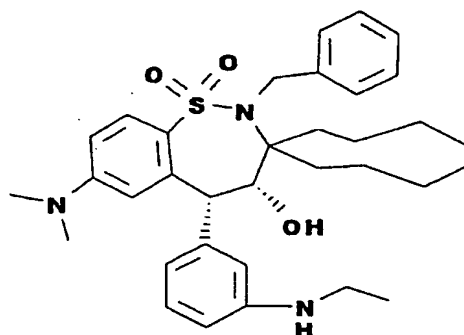
N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに使用した以外は、実施例1工程10の方法に従った。<sup>1</sup>H NMRは該生成物に一致した。MS (M+H<sup>+</sup>) 580。

## 【0256】

実施例22

(4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-5-[3-(エチルアミノ)フェニル]-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

## 【化117】



## 【0257】

エタノール50mLを溶媒とする実施例21工程4において調製した化合物50mg (0.09 mmol)の溶液に、Pearlman触媒約10mgを添加した。この混合液を、60psi H<sub>2</sub>で20時間水素添加した。反応混合液に、Pearlman触媒約10mgを添加し、混合液を、60 psi下60℃で20時間、水素添加した。反応混合液を濾過し、かつ酢酸エチル50mLで洗浄した。濾液を、水(2 x 50mL)および塩水(50mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、残留物39.8mgを得た。残留物を、フラッシュクロマトグラフィーで精製し、(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-5-[3-(エチルアミノ)フェニル]-2,3,4,5-テトラヒドロ-2-(フェニルメチル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド12.6mgを得た。

<sup>1</sup>H NMR

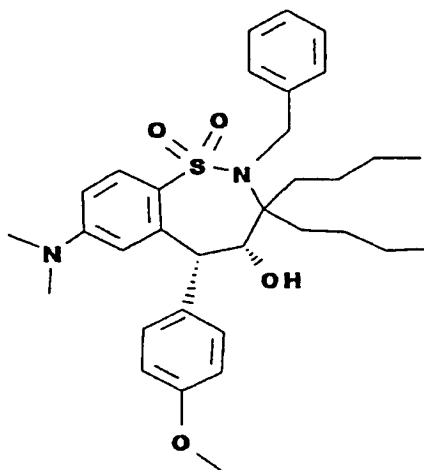
(CDCl<sub>3</sub>) δ 0.72 (t, *J* = 6.6, 3H), 0.90 (t, *J* = 7.4 Hz), 1.00-1.98 (m, 15H), 2.81 (s, 6H), 3.17 (q, *J* = 7.2 Hz, 2H), 4.15 (d, *J* = 7.8 Hz, 1H), 4.39 (s, 2H), 5.69 (s, 1H), 6.12 (s, 1H), 6.47 (dd, *J* = 2.7, 9.0 Hz, 1H), 6.61-6.65 (m, 1H), 6.78-6.83 (m, 1H), 6.95-7.00 (m, 1H), 7.16-7.31 (m, 5H), 7.40 (d, *J* = 7.2 Hz, 1H), 7.81 (d, *J* = 8.7 Hz, 1H). MS (M+H<sup>+</sup>) 578.

## 【0258】

## 実施例23

(4R, 5R)-3,3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2,3,4,5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-(フェニルメチル)-1,2-ベンゾチアゼピン-4-オール 1,1-ジオキシド

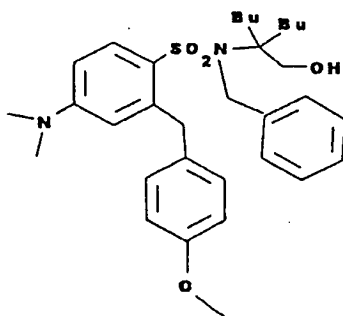
## 【化118】



## 【0259】

工程1. N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

## 【化119】



## 【0260】

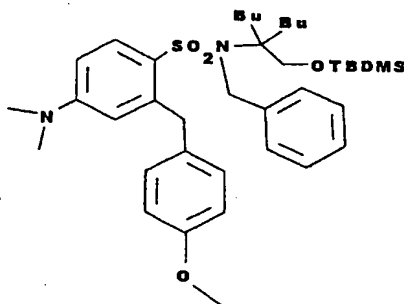
ジメチルホルムアミド30mLを溶媒とする前記実施例7の工程1で調製したスルホンアミド2.15g(4.05mmol)溶液に、95%水素化ナトリウム123mg、その後臭化ベンジル964 $\mu$ Lを添加した。反応混合液を、18時間攪拌した。反応混合液に、酢酸エチル250mLを添加し、この混合液を飽和炭酸水素ナトリウム溶液(100mL)および塩水(150mL)で洗浄した。酢酸エチル相を、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを得た。

ル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド2.88gを得た。

【0261】

工程2. N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

【化120】



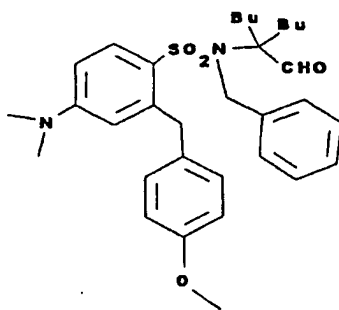
【0262】

N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドに代えた以外は、実施例1の工程8の方法に従った。

【0263】

工程3. N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミド

【化121】



## 【0264】

N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例13の工程3の方法に従った。

## 【0265】

工程4. (4R, 5R)-3, 3-ジブチル-7-(ジメチルアミノ)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-2-(フェニルメチル)-1, 2-ベンゾチアゼピン-4-オル 1, 1-ジオキシド

N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-(フェニルメチル)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-ホルミルペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例1工程10の方法に従った。

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 0.7 (m, 3H), 0.9 (m, 3H), 1-1.7 (m, 10H), 1.9 (m, 1H), 2.1 (m, 1H), 2.8 (s, 6H), 3.8 (s, 3H), 4.1 (s, 1H), 4.4 (s, 2H), 5.8 (s, 1H), 6.0 (s, 1H), 6.5 (m, 1H), 7.0 (d, J = 8 Hz, 1H), 7.1-7.5 (m, 7H), 7.8 (m, 1H).

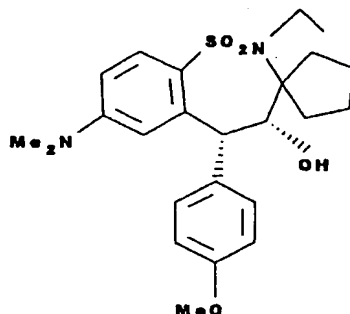
## 【0266】

## 実施例24

(4R, 5R)-7-ジメチルアミノ)-2-エチル-4, 5-ジヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-スピロ[1, 2-ベンゾチアゼピン-3(2H), 1'-シクロペンタン-4-オル 1, 1-ジオキシ

ド

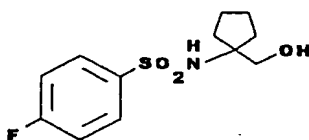
【化122】



【0267】

工程1. N-[1-(ヒドロキシメチル)シクロペンチル]-4-フルオロベンゼンスルホンアミド

【化123】



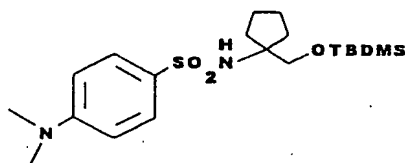
【0268】

シクロロイシノールを2-アミノ-2-ブチルヘキサノールに代えた以外は、実施例1工程2の方法に従った。

【0269】

工程2-3. N-[1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]シクロペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミド

【化124】



【0270】

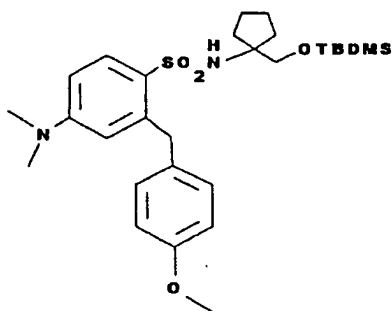
N-[1-(ヒドロキシメチル)シクロペンチル]-4-フルオロベンゼンスルホンアミド

ドを、N-[1-ブチル-1-(ヒドロキシメチル)ペンチル]-4-フルオロベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例1の工程3および工程4の方法に従った。

### 【0271】

工程4. N-[1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]シクロペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミド

### 【化125】



### 【0272】

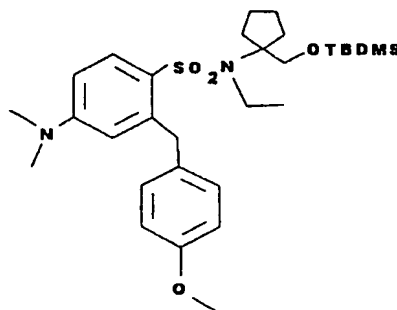
N-[1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]シクロペンチル]-4-(ジメチルアミノ)ベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1,1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例7の工程1の方法に従った。

### 【0273】

工程5. N-[1-(ヒドロキシメチル)シクロペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-エチルベンゼンスルホンアミド

### 【化126】





## 【0274】

テトラヒドロフラン5mLを溶媒とする前記工程4で調製したスルホンアミド0.25g(0.49mmol)の溶液に、95%水素化ナトリウム25mgを添加した。15分後、反応混合液に、ヨウ化エチル125 $\mu$ Lを添加した。反応混合液を16時間攪拌した。反応混合液に、ジメチルホルムアミド5mLを添加し、かつ混合液を4時間攪拌した。反応混合液に水100mLを添加し、この混合液を酢酸エチル100mLで抽出した。酢酸エチル相を、塩水(100mL)で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濃縮し、油状物0.27gを得た。

## 【0275】

工程6-8. (4R, 5R)-7-ジメチルアミノ)-2-エチル-4, 5-ジヒドロ-5-(4-メトキシフェニル)-スピロ[1, 2-ベンゾチアゼピン-3(2H), 1'-シクロペンタン]-4-オール 1, 1-ジオキシド

N-[1-(ヒドロキシメチル)シクロペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(4-メトキシフェニル)メチル]-N-エチルベンゼンスルホンアミドを、N-[1-ブチル-1-[[[(1-ジメチルエチル)ジメチルシリル]オキシ]メチル]ペンチル]-4-(ジメチルアミノ)-2-[(3-ニトロフェニル)メチル]-N-メチルベンゼンスルホンアミドの代わりに用いた以外は、実施例1工程8-10の方法を用いた。 $^1\text{H}$  NMRは、該生成物と一致した。MS ( $\text{M}+\text{H}^+$ ) 445。

## 【0276】

生物学的アッセイ法

本発明の化合物の有用性を、下記のアッセイ法により示す。これらのアッセイ法は、本発明の有用性を示すことが認められた方法を本質的に用いて、インビト

ロおよび動物モデルにおいて行う。

### 【0277】

#### H14細胞における $[^{14}\text{C}]$ -タウロコレート(TC)のIBAT-媒介型取り込みを阻害する化合物のインビトロアッセイ法

ヒトIBATのcDNAでトランスフェクションしたベビーハムスター腎細胞(BHK)(H14細胞)を、96ウェルTop-Count組織培養プレート中に、播種の24時間以内にアッセイを行う際には、60,000細胞/ウェル；播種の48時間以内にアッセイを行う際には、30,000細胞/ウェル；および播種の72時間以内にアッセイを行う際には、10,000細胞/ウェルで播種した。

### 【0278】

アッセイ当日、細胞単層を、アッセイ緩衝液(グルコース4.5g/L+0.2%(w/v)脂肪酸非含有ウシ血清アルブミン((FAF)BSAを含有するダルベッコの改良イーグル培地)100mLで、穏やかに洗浄した。各ウェルに、アッセイ緩衝液中の被験化合物の2倍濃縮物50mLを、アッセイ緩衝液中の6mM  $[^{14}\text{C}]$ -タウロコレート50mL(最終濃度3mM  $[^{14}\text{C}]$ -タウロコレート)と共に添加した。この細胞培養プレートを、37℃で2時間インキュベーションし、その後4℃の0.2%(w/v)(FAY)BSAを含有するダルベッコのリン酸緩衝生理食塩水(PBS)100mLで2回十分に穏やかに洗浄した。その後これらのウェルを、4℃の(FAY)BSAを含有しないPBS 100mLで1回穏やかに洗浄した。各液体200mLに、シンチレーション計測液を添加し、プレートを熱により密封し、室温で30分間振盪し、その後Packard Top-Count機器で各ウェル中の放射エネルギーを測定する。

### 【0279】

#### $[^{14}\text{C}]$ -アラニンの取り込みを阻害する化合物のインビトロアッセイ法

アラニン取り込みアッセイ法は、標識タウロコレートを標識アラニンに代えた以外は、タウロコレートアッセイ法と同じ方法で行う。

### 【0280】

このアッセイ法の注目される化合物の各々のデータを、下記表4に示す。

### 【0281】

#### 【表4】

化合物 (実験番号)	ヒト TC IC <sub>50</sub> ( $\mu$ M)	アラニン取り込み IC <sub>50</sub>
1	1.2	
2	0.32	
3	0.69	
4	0.083	>100
5	0.97	
6	0.32	
7	0.57	
8	0.58	
10	0.31	
11	0.20	
12	1.2	
13 (シス)	0.044	
13 (トランス)	0.21	
14	0.006	
15	0.022	
16	0.0016	
17	0.035	
18	0.026	
19	0.003	>100
20	0.008	
21		>1.0
22	2.5	
24	13.9	

## 【0282】

胆汁への[<sup>14</sup>C]-タウロコレートのラット回腸取り込みを阻害する化合物のインビ  
ボアッセイ法

(Uneらの、「ハムスターにおける3 $\alpha$ ,7 $\beta$ -ジヒドロキシ-7 $\beta$ -メチル-5 $\beta$ -コラ

ン酸および $3\alpha, 7\beta$ -ジヒドロキシ- $7\alpha$ -メチル- $5\beta$ -コラン酸の代謝」、Biochimica et Biophysica Acta、833:196-202(1985)を参照のこと)

### 【0283】

オスのウィスターラット(200~300g)を、イナクチン100mg/kgで麻酔した。胆管に、長さ10"のPE10チューブをカニユーレ挿管する。小腸を露出し、ガーゼパッド上に置いた。カニユーレ(1/8" ルエル-ロック、先端にメス型アダプター)を、小腸と盲腸の接合部から12cmの位置で挿入する。同じ接合部から4cmの位置に、スリットを入れる(回腸長さ8cmを用いる)。温めたダルベッコのリン酸緩衝生理食塩水pH6.5(PBS)20mLを用いて、腸管区域を洗い流した。遠位開口部に、長さ20cmのシリコンチューブをカニユーレ挿管する(0.02" I.D. x 0.037" O.D.)。近位カニユーレは、蠕動ポンプにフックで引っ掛け、かつ腸管は、温めたPBSの0.25mL/分で20分間洗浄する。腸区域の温度を連続してモニタリングする。実験開始時に、対照試料( $[^{14}\text{C}]$ -タウロコレート @0.05 mi/ml、5mM冷タウロコレートと共に)を、腸区域に3mL注射器で負荷し、かつ胆汁試料の収集を開始する。対照試料は、0.25mL/分の速度で21分間注入する。胆汁試料画分を、操作の最初の27分間は、3分毎に収集する。試料注入の21分後に、回腸ループを、温かいPBS 20mLで洗浄し(30mL注射器を用いる)、その後ループを温かいPBS、0.25mL/分で、21分間洗浄する。第二の灌流を、前述のように開始するが、被験化合物が同様に投与され(21分間の投与、その後21分間の洗浄)、かつ胆汁試料は最初の27分間は3分毎に収集する。必要ならば、第三の灌流を、前述のように行い、典型的には対照試料を含む。

### 【0284】

#### 肝コレステロール濃度の測定(HEPATIC CHOL)

肝組織を、秤量し、クロロホルム：メタノール(2:1)中でホモジネートする。ホモジネートしかつ遠心した後、上清を分離し、窒素下で乾燥する。残留物を、イソプロパノール中に溶解し、そのコレステロール含量を、Allain, C. A. ら、Clin. Chem.、20:470(1974)に記されたように、コレステロールオキシダーゼおよびペルオキシダーゼの組合せを用いて、酵素的に測定する。

### 【0285】

肝HMG CoA-レダクターゼ活性の測定(HMG CoA)

肝試料を、リン酸／ショ糖緩衝液中でホモジネートし、その後遠心分離し、肝ミクロソームを調製する。最終ペレット材料を、緩衝液中に再懸濁し、かつアリコートをし、 $^{14}\text{C}$ -HMG-CoA (Dupont-NEN社)の存在下で、37°Cで60分間インキュベーションし、HMG CoAレダクターゼに関してアッセイする。この反応は、6N HClの添加、その後の遠心により停止する。上清のアリコートを、薄層クロマトグラフィーにより分離し、酵素生成物に相当するスポットを、プレートから削ぎ落とし、抽出し、かつ放射能をシンチレーション計数により決定する(参考文献: Akerlund, J. and Bjorkhem, I., J. Lipid Res. 31:2159(1990))。

【0286】

血清コレステロールの測定(SER. CHOL、HDL-CHOL、TGIおよびVLDL + LDL)

総血清コレステロール(SER. CHOL)は、市販のキット(Wako Fine Chemicals (リッチモンド、VA) ; コレステロールC11、カタログ番号276-64909)を用いて、酵素により測定する。HDLコレステロール(HDL. CHOL)は、Sigma Chemical社、HDLコレステロール試薬、カタログ番号352-3(硫酸デキストラン法)を用いてVLDLおよびLDLを沈殿した後に、同じキットを用いてアッセイする。総血清トリグリセリド(ブランク)(TGI)は、Sigma Chemical社、GPO-Trinder、カタログ番号337-Bにより、酵素を用いてアッセイする。VLDLおよびLDL (VLDL + LDL) コレステロール濃度は、総コレステロールおよびHDLコレステロールの差異から算出する。

【0287】

肝コレステロール7- $\alpha$ -ヒドロキシラーゼ活性の測定(7 $\alpha$ -OHase)

肝試料を、リン酸／ショ糖緩衝液中で肝試料をホモジネートし、その後遠心分離し、肝ミクロソームを調製する。最終ペレット材料を、緩衝液中に再懸濁し、かつアリコートを、NADPHの存在下で、37°Cで5分間インキュベーションすることにより、コレステロール7- $\alpha$ -ヒドロキシラーゼ活性についてアッセイする。石油エーテルで抽出後、有機溶媒を蒸発させ、かつ残留物をアセトニトリル／メタノール中に溶解する。抽出物のアリコートをC<sub>18</sub> 逆相HPLCカラムに注入し、かつ分離された物質を240nmでのUV検出により定量することにより、酵素的生成物を分離する。(参考文献: Horton, J. D. ら、J. Clin. Invest., 93:2084(1994))。

## 【0288】

ラットの胃管栄養アッセイ法

オスのウィスターラット(275～300g)に、経口胃管栄養法を用いて、IBAT阻害剤を投与する。薬物またはビヒクル(水中の0.2% Tween80)を、最終容量2mL/kg体重中の様々な用量で、1日1回(9:00～10:00 a.m.)、4日間投与する。処置期間の最後の48時間にわたって、総糞便試料を収集し、下記に記された酵素アッセイ法を用いて、胆汁酸含量について分析する。化合物の効能は、処置したラットの糞便中胆汁酸(FBA)濃度の増加を、ビヒクル群のラットの平均FBA濃度と比較することにより、決定する。表5は、実施例4の化合物を試験した場合の、このアッセイ結果を説明している。

【表5】

化合物 (実験番号)	用量 (mg/kg/day)	糞便胆汁酸濃度の 増加率%
4	5	217.2
4	0.4	157.8
4	0.04	244.0

## 【0289】

糞便胆汁酸濃度の測定(FBA)

個飼のハムスターからの総糞便排泄物を、24時間または48時間収集し、窒素掃流下で乾燥し、粉碎しかつ秤量した。およそ0.1gを測定し取り出し、有機溶媒ブタノール/水)で抽出した。分離および乾燥後、残留物をメタノールに溶解し、存在する胆汁酸量を、3 $\alpha$ -ヒドロキシステロイドステロイドデヒドロゲナーゼの胆汁酸と反応しNADを還元することを用い、酵素的に測定する(参考文献:Mashige, F.ら、Clin. Chem.、27:1352(1981))。

## 【0290】

ウサギのブラッシュ・ボーダー膜小胞(BBMV)における[<sup>3</sup>H]タウロコレートの取り込み

ウサギ回腸のブラッシュ・ボーダー膜を、凍結した回腸粘膜から、Malathiら

記したカルシウム沈殿法により調製する(参考文献: Biochimica Biophysica Acta, 554:259(1979))。タウロコレート測定法は、アッセイ容量を100 $\mu$ Lの代わりに200 $\mu$ Lとした以外は、本質的にKramerらにより説明されているものである(参考文献: Biochimica Biophysica Acta, 1111:93(1992))。簡単に述べると、室温で、2 $\mu$ M [ $^3$ H]-タウロコレート(0.75 $\mu$ Ci)、20mM トリス、100mM NaCl、100mM マンニトールを含有する溶液(pH7.4)190 $\mu$ Lを、ブラッシュ・ボーダー膜小胞10 $\mu$ L(60~120 $\mu$ gタンパク質)と共に、5秒間インキュベーションする。インキュベーションは、激しく攪拌しながらのBBMVを添加することにより開始し、その反応は、氷冷緩衝液(20mM HEPES-トリス、150mM KCl)5mLの添加により停止し、その後迅速にナイロンフィルター(0.2 $\mu$ m孔径)を通して濾過し、かつ停止緩衝液5mLで洗浄する。

#### 【0291】

##### アシル-CoA: コレステロールアシルトランスフェラーゼ (ACAT)

ハムスター肝およびラット腸管ミクロソームを、先に説明したように、組織から調製し(参考文献: J. Biol. Chem., 255:9098(1980))、かつACAT酵素給源として使用する。アッセイ法は、0.25% BSAを含有する50mMリン酸ナトリウム、2mM DTT(pH7.4)緩衝液中に24 $\mu$ M オレイル-CoA(0.05 $\mu$ Ci)およびミクロソームタンパク質200 $\mu$ gを含有する2.0mLのインキュベーションからなる。反応は、オレイル-CoAの添加により開始し、反応を、37°Cで5分間進行し、クロロホルム/メタノール(2:1)8.0mLの添加により停止する。抽出液に、クロロホルム/メタノール中のコレステロールオレエート125 $\mu$ gを添加し、担体として作用させ、かつ抽出液の有機相および水相を、激しく攪拌した後、遠心により分離する。クロロホルム相は乾燥させ、その後シリカゲル60TLCプレート上にスポットし、かつヘキサン/エチルエーテル(9:1)で展開する。生成されたコレステロールエステルの量は、Packard instamagerにより、TLCプレート上のコレステロールオレエートスポットに組込まれた放射能の量を測定することにより決定する。本明細書に記した実施例は、全般的または具体的に説明された前述の実施例において使用されたような本発明の反応体および/または操作条件を置き換えることにより、同様にうまく繰り返すことができる。

## 【０２９２】

従って本発明は、多くの方法で変動することができることは明らかである。このような変動は、本発明の精神および範囲から逸脱するものとはみなされず、かつこのような修飾および同等物は全て特許請求の範囲に含まれる。



## 【国際調査報告】

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

		International Application No. PCT/US 00/02503
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER IPC 7 C07D281/02 A61K31/55 A61P3/06 C07D417/12		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) IPC 7 C07D A61K		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal, WPI Data, PAJ, BEILSTEIN Data, CHEM ABS Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 98 38182 A (GLAXO GROUP LTD ; HANDLON ANTHONY LOUIS (US); HODGSON GORDON LEWIS) 3 September 1998 (1998-09-03) Formula (ie) claims 1,6	1-103
A	WO 98 02432 A (SUGIURA YOSHIHIRO ; DOI TAKAYUKI (JP); KATO KANEYOSHI (JP); KAWADA) 22 January 1998 (1998-01-22) cited in the application claim 8	1
A	WO 96 16051 A (WELLCOME FOUND ; BRIEADDY LAWRENCE EDWARD (US); HANDLON ANTHONY LOU) 30 May 1996 (1996-05-30) cited in the application claim 1	1-103
-/-		
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of box C. <input checked="" type="checkbox"/> Patent family members are listed in annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubt on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance: the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance: the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "Z" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search  28 July 2000		Date of mailing of the international search report  09.08.00
Name and mailing address of the ISA European Patent Office, P.O. 5018 Patentstein 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel: (+31-70) 340-2040, Tx. 31 851 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer  Gettins, M

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 1992)

page 1 of 2

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		International Application No PCT/US 00/02503
Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 96 05188 A (WELLCOME FOUND ;BRIEAODY LAWRENCE EDWARD (US)) 22 February 1996 (1996-02-22) cited in the application claim 1 -----	1-103

Form PCT/ISA/10 (continuation of second sheet) (July 1992)

page 2 of 2

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.  
PCT/US 00/02503

## Box I Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 1 of first sheet)

This International Search Report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(e) for the following reasons:

1. ☒ Claims Nos.:  
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:  
Although claims 161-166 are directed to a method of treatment of the human/animal body, the search has been carried out and based on the alleged effects of the compound/composition.
2. ☒ Claims Nos.: 104-154 -all other claims only searched partially  
because they relate to parts of the International Application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:  
see FURTHER INFORMATION sheet PCT/ISA/210
3. ☐ Claims Nos.:  
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

## Box II Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 2 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this International Search Report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this International Search Report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this International Search Report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

Form PCT/ISA/210 (continuation of first sheet (1)) (July 1998)

## FURTHER INFORMATION CONTINUED FROM PCT/ISA/ 210

Continuation of Box I.2

Claims Nos.: 104-154 -all other claims only searched partially

Present claims 1-166 relate to an extremely large number of possible compounds. In fact, the claims contain so many options, variables, possible permutations (e.g. prodrug), huge definitions (such as hydrocarbyl or containing at least one heteroatom) and provisos that a lack of clarity (and/or conciseness) within the meaning of Article 6 PCT arises to such an extent as to render a meaningful search of the claims impossible. Consequently, the search has been carried out for those parts of the application which do appear to be clear (and/or concise), namely those compounds recited in the physically characterised and tested examples 1-24 on pages 284-327 and closely related homologous compounds as defined in the next paragraph. It is noted that only compounds of the formula (I) appear to have been exemplified and that there are no examples of formulae (III), (IV) or (V). It should be noted that only examples which are clearly defined and physically characterised have been taken into consideration. Examples 101-1652 do not appear to be defined as regards the RN substituent and are therefore not examples which are adequately defined for supporting the scope of the claims.

The search has been limited to the examples and a generalisation thereof to compounds of formula (I) in which R3 and R4 are H and OH, R5 is hydrogen and R6 is a (substituted) phenyl.

The applicant's attention is drawn to the fact that claims, or parts of claims, relating to inventions in respect of which no international search report has been established need not be the subject of an international preliminary examination (Rule 66.1(e) PCT). The applicant is advised that the EPO policy when acting as an International Preliminary Examining Authority is normally not to carry out a preliminary examination on matter which has not been searched. This is the case irrespective of whether or not the claims are amended following receipt of the search report or during any Chapter II procedure.

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No.

PCT/US 00/02503

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 9838182 A	03-09-1998	AU 6823898 A	18-09-1998
WO 9802432 A	22-01-1998	AU 3460797 A JP 10338672 A	09-02-1998 22-12-1998
WO 9616051 A	30-05-1996	AT 189891 T AU 706325 B AU 3876295 A BR 9509683 A CZ 9701473 A DE 69515183 D EP 0792268 A ES 2144151 T FI 972085 A HU 77412 A JP 11500102 T NO 972261 A NZ 295426 A PL 320093 A US 5998400 A	15-03-2000 17-06-1999 17-06-1996 16-09-1997 12-11-1997 30-03-2000 03-09-1997 01-06-2000 15-05-1997 28-04-1998 06-01-1999 16-07-1997 24-10-1997 15-09-1997 07-12-1999
WO 9605188 A	22-02-1996	AP 720 A AU 696073 B AU 4426096 A BG 62048 B BG 101209 A BR 9508586 A CA 2197099 A CZ 9700373 A EP 0775126 A FI 970531 A HU 77129 A IL 114877 A JP 2935756 B JP 10504035 T NO 970585 A NZ 290911 A PL 318496 A SK 17797 A	08-01-1999 03-09-1998 07-03-1996 29-01-1999 29-08-1997 14-07-1998 22-02-1996 13-08-1997 28-05-1997 07-02-1997 02-03-1998 14-07-1999 16-08-1999 14-04-1998 07-04-1997 28-07-1998 23-06-1997 10-09-1997

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (July 1992)

フロントページの続き

(81) 指定国 EP(AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AP(GH, GM, KE, LS, MW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), AE, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW

(72) 発明者 レイツ デイビッド ビー.

アメリカ合衆国 ミズーリ州 チェスター  
フィールド プレザント リッジ コート

14814

F ターム(参考) 4C036 AB01 AB04 AB06 AB07 AB10  
AB11 AB12 AB15 AB17 AB20  
4C063 AA01 BB08 CC66 DD12 EE01  
4C086 AA02 AA03 BC92 GA16 MA02  
MA05 NA14 ZA45 ZC33

PCT

WORLD INTELLECTUAL PROPERTY ORGANIZATION  
International Bureau



INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

<b>(51) International Patent Classification 7 :</b> C07D 281/02, A61K 31/55, A61P 3/06, C07D 417/12		<b>A2</b>	<b>(11) International Publication Number:</b> WO 00/47568
			<b>(43) International Publication Date:</b> 17 August 2000 (17.08.00)
<b>(21) International Application Number:</b> PCT/US00/02503 <b>(22) International Filing Date:</b> 10 February 2000 (10.02.00) <b>(30) Priority Data:</b> 60/119,933 12 February 1999 (12.02.99) US <b>(71) Applicant (for all designated States except US):</b> G.D. SEARLE & CO. [US/US]; Corporate Patent Department, 5200 Old Orchard Road, Skokie, IL 60077 (US). <b>(72) Inventors; and</b> <b>(75) Inventors/Applicants (for US only):</b> TOLLEFSON, Michael, B. [US/US]; 357 Big Horn Drive, Hainesville, IL 60030 (US). KOLODZIEJ, Steve, A. [US/US]; 2448 Clarjon Road, Ballwin, MO 63021 (US). REITZ, David, B. [US/US]; 14814 Pleasant Ridge Court, Chesterfield, MO 63017 (US). <b>(74) Agents:</b> WARNER, James, M. et al.; G.D. Searle & Co., Corporate Patent Department, 5200 Old Orchard Road, Skokie, IL 60077 (US).			<b>(81) Designated States:</b> AE, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW, ARIPO patent (GH, GM, KE, LS, MW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), Eurasian patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), European patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).  <b>Published</b> <i>Without international search report and to be republished upon receipt of that report.</i>
<b>(54) Title:</b> NOVEL 1,2-BENZOTHAZEPINES HAVING ACTIVITY AS INHIBITORS OF ILEAL BILE ACID TRANSPORT AND TAUROCHOLATE UPTAKE			
<b>(57) Abstract</b>  Novel 1,2-benzothiazepines, derivatives and analogs thereof, pharmaceutical compositions containing them, and their use in medicine, particularly in the prophylaxis and/or treatment of hyperlipidemic diseases, conditions and/or disorders, such as those associated with atherosclerosis and/or hypercholesterolemia.			

16

**THIS PAGE BLANK (USPTO)**